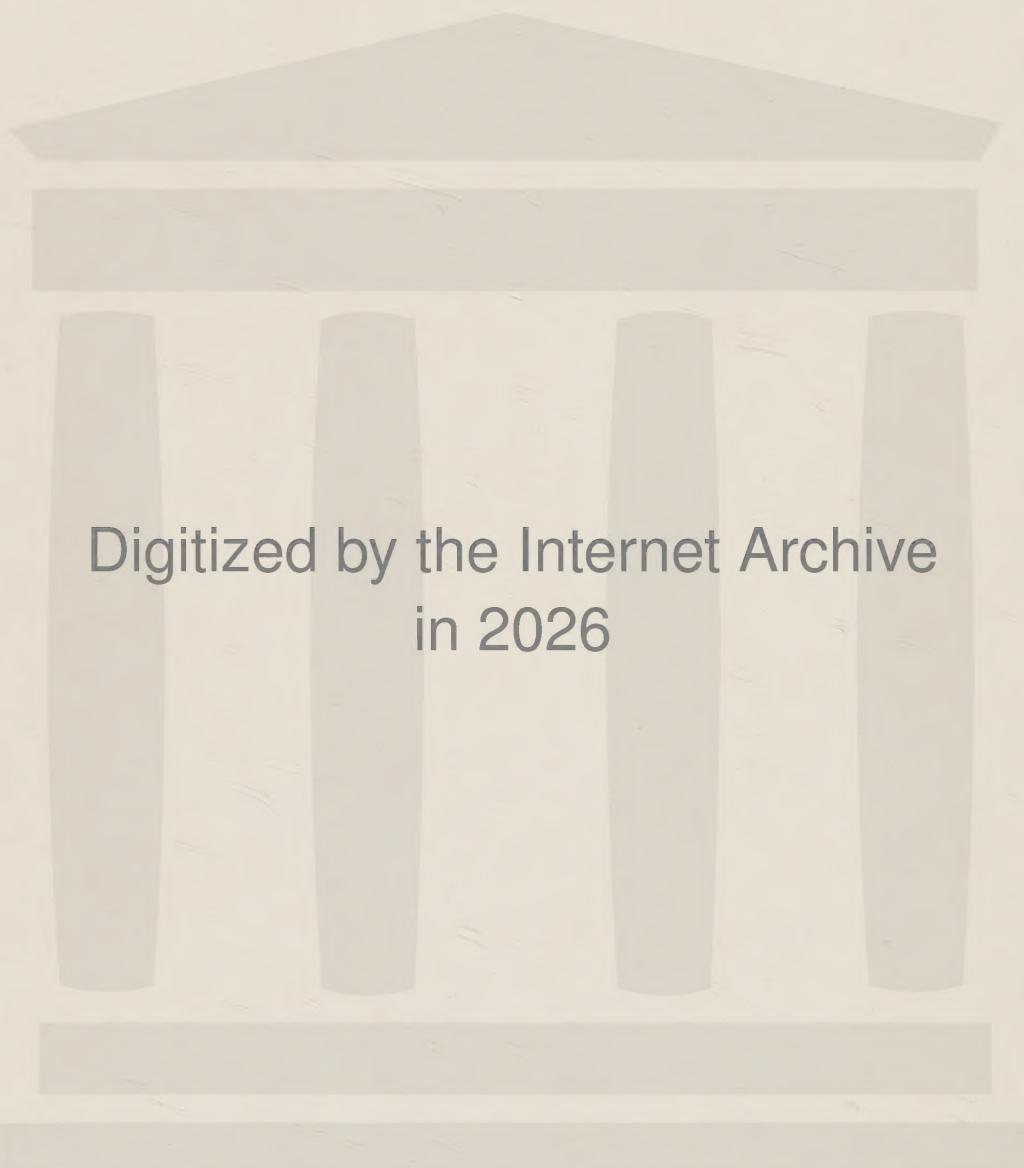


Frankfurt ^om 1975

R. Opperman



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550826_0045

FELDTHEORETISCHE UNTERSUCHUNGEN
ZUR STATIK KRITISCHER PHANOMENE

Inaugural-Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik
der
Johann-Wolfgang-Goethe-Universität
zu Frankfurt am Main

von
Reinhold Oppermann
aus Frankfurt am Main

Frankfurt am Main

Mai 1975



Inhaltsverzeichnis

I. Einleitung

II. Methoden zur Behandlung vektorielles Felder

1. Skalarfeld

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik

der Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt am Main

a. Ableitung der Maxwell-Gleichungen aus einer einzigen

zur relativistischen Elektrodynamik

Maxwell's Theorie

b. Vektorfeld

a. Skalarprodukt

b. Kreuzprodukt

c. Divergenz und Rotation

des Gauß'schen Theorems

III. Anwendungen der Maxwell-Theorie auf elektromagnetische

a-Vektorfelder

1. a-Vektorfelder für elektromagnetische und mechanische

Phänomene

2. die Maxwell-Gleichungen

a. - bei konstanten Feldern

b. - bei zeitlich veränderlichen Feldern

c. - bei veränderlichen Feldern

in Vakuum

3. die Maxwell-Gleichungen für Materie

a. - bei konstanten Feldern

b. - bei zeitlich veränderlichen Feldern

2. Gutachter: Prof. Dr. R. J. Jelitto

Tag der mündlichen Prüfung

und Tag der Promotion: 30. Oktober 1975

Inhaltsangabe

I.	Einleitung	1
II.	Methoden zur Behandlung kritischer Phänomene	13
1.	exakt lösbare Modelle	13
2.	Hochtemperatur-Entwicklung	16
3.	Skalentheorie	17
a.	Skalenhypothese und Kadanoff's Renormierungsgruppe	
b.	Ableitung der Skalengesetze aus einer Analogie zur relativistischen Quantenfeldtheorie: Polyakov's Theorie	
4.	Wilson-Theorie	25
a.	Renormierungsgruppe	
b.	Diagrammentwicklung in $\epsilon=4-d$	
c.	Diagrammentwicklung in $1/n$; n =Anzahl der Komponenten des Ordnungsparameters	
III.	Anwendungen der Wilson-Theorie auf allgemeine n -Vektor Modelle	39
1.	n -Vektor Modelle für magnetische und strukturelle Phasenübergänge mit axialer Anisotropie	39
2.	die Relevanz kubischer ϕ^4 -Störungen	60
a.	- bei kurzreichweitiger Wechselwirkung	
b.	- bei langreichweitiger Wechselwirkung	
c.	Crossover bei verschwindender axialer Anisotropie in Modellen mit kubisch kritischem Verhalten	
3.	axiale Anisotropie und multikritisches Verhalten	76
a.	Vielkomponentensysteme mit hyperkubischer Symmetrie	
b.	isotrope Vielkomponentensysteme mit ϕ^4 - und ϕ^6 - Wechselwirkungen	
4.	ein erweitertes Potts-Modell	87
IV.	Zusammenfassung	95
V.	Anhang	96
VI.	Literaturverzeichnis	98

I. Einleitung

Phasenübergänge sind Symmetrienumwandlungen von Vielteilchen-Systemen bei einer kritischen Temperatur T_c und geeigneter Wahl der übrigen kritischen Variablen. Eine praktische Bedeutung kommt bis heute nur solchen Systemen zu, die für die Theorie als fast-unendlich gelten dürfen, weshalb die mit der Kleinheit der Systeme zunehmende Verschmierung der Phasenübergänge unbeachtet bleiben darf.

Zu den wesentlichen Charakteristika der Phasenübergänge zählen die kritische Verlangsamung zeitabhängiger Fluktuationen, repräsentiert durch am kritischen Punkt gegen null gehende Anregungsfrequenzen (soft modes), sowie eine mit $\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}$ divergierenden Korrelationslänge ξ . In der theoretischen Beschreibung ergeben sich stets bei der Frequenz null derart stark gewichtete Fluktuations-Propagatoren, so daß der folgende wichtige Satz resultiert:

Die Statik kritischer Phänomene ist von der Dynamik unabhängig, wenn $T_c > 0$. Dagegen können im Grenzfall $T_c = 0$ quantenmechanische Nullpunktsschwankungen die statischen kritischen Fluktuationen je nach Typ der Dynamik charakteristisch beeinflussen. Es ist zu vermuten, daß dies auch bei sehr kleinen endlichen T_c der Fall ist, wenn das System nur klein genug ist. In der vorliegenden Arbeit werden solche Ausnahmefälle jedoch nicht betrachtet, so daß hier die Dynamik, deren Struktur als noch nicht verstanden gelten muß, keine Rolle spielt. Darüberhinaus existieren keine Quanteneffekte und die mikroskopische Information etwa über die Atomgruppen eines Kristalls fließt nur in die Parameter des entsprechenden klassischen Modells ein.

Die grundlegenden Wesenszüge, die allen kritischen Phänomenen gemein sind, werden seit Beginn der "modernen Ära der Phasenübergänge" (Stanley¹) vornehmlich durch kritische Exponenten beschrieben. Deren Aufgabe ist, das gebrochene Potenzverhalten des kritischen Anteils physikalischer Größen, d.h. in der Nähe des kritischen Punktes, zu bestimmen. So erwartet man bei Magneten für die Magnetisierung $M \propto H^{1/\delta}$ bei $T = T_c$ und $M \propto |T - T_c|^\beta$ bei $H = 0$, wobei H das zu M konjugierte Magnetfeld ist. Zu dem wichtigsten singulären Verhalten gehört das der Nullfeld-Suszeptibilität $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$ und das der

spezifischen Wärme $c \propto |T - T_c|^{-\alpha}$. Zusätzliche fast-kritische Freiheitsgrade eines Systems zeigen sowohl kritisches wie nicht-kritisches Verhalten insofern, als die kritischen Exponenten unverändert sind, während die Proportionalitätsfaktoren der obigen Potenzgesetze sehr groß werden und im kritischen Grenzfall ebenfalls ein singuläres Potenzverhalten zeigen können. Daher werden diese Proportionalitätsfaktoren "kritische Amplituden" genannt. Das kritisch-werden dieser Amplituden charakterisiert den sogenannten crossover, da in diesem Grenzfall das singuläre Verhalten der entsprechenden physikalischen Größe (d.h. deren Exponenten) verändert wird.

Besonders wichtig ist auch das Potenzverhalten der Korrelationsfunktion $K(r)$ ($\propto$ Suszeptibilität) für große Abstände r , das bei $T = T_c$ durch $K(r) \propto r^{-(d-2+\eta)}$ für $r \rightarrow \infty$ beschrieben wird.

Die kritischen Exponenten γ, α , etc., die sowohl unterhalb wie oberhalb T_c in ähnlicher Weise definiert werden können, unterscheiden sich nach allen theoretischen und experimentellen Erkenntnissen nicht danach, ob T_c aus der geordneten oder der ungeordneten Phase erreicht wird.

Eine systematische Zusammenstellung statischer kritischer Exponenten ist bei Wegner² zu finden.

Nichtkritische Anteile physikalischer Größen, etwa der Korrelationsfunktion für kleine Abstände, sind für die Beschreibung der kritischen Phänomene unwesentlich.

Das Konzept der kritischen Exponenten und Amplituden ist gleichermaßen auf unterschiedlichste Systeme anwendbar, da durch Einführung eines Ordnungsparameters eine einheitliche Beschreibung kritischer Phänomene ermöglicht wird. Beispiele für Ordnungsparameter sind die Magnetisierung bei Magneten, die gitterdynamische Normalkoordinate bei strukturellen Phasenübergängen, die Kondensat-Wellenfunktion bei Superflüssigkeiten und Supraleitern sowie die Orientierungsanisotropie bei flüssigen Kristallen. Die in allen Fällen divergierende Korrelationslänge läßt es als unwahrscheinlich erscheinen, daß Wechselwirkungs-Details, die auf einer um viele Größenordnungen kleineren Längenskala zu messen sind, das kritische Verhalten wesentlich formen können. Dies macht die folgende Universalitätshypothese plausibel, die in Wirklichkeit aus experimentellen Einsichten gewachsen ist¹:

Die Universalitätshypothese postuliert die Unabhängigkeit der kritischen Exponenten von allen mikroskopischen Details. Das hat insbesondere auch die Unabhängigkeit von der kritischen Temperatur zur Folge, weil T_C natürlich von Wechselwirkungs-Parametern mitbestimmt wird.

Nach dem heutigen Erkenntnisstand existieren abgesehen von der Symmetrie nur drei Parameter, von denen die kritischen Exponenten abhängen dürfen, nämlich die Ortsraumdimension d , die Anzahl n der Ordnungsparameter-Komponenten sowie der Parameter σ , der die Reichweite der Wechselwirkung mit $V(x) \propto x^{-d-\sigma}$ angibt. In den Exponenten tritt σ aber nur im Bereich langreichweitiger Wechselwirkungen, ie für $\sigma < 2$, auf. Diese σ -Abhängigkeit wird aus dem Beispiel der eindimensionalen Systeme, bei denen Phasenübergänge überhaupt erst durch langreichweitige Kräfte erzeugt werden können, verständlich. Im übrigen gibt es allerdings auch theoretische Modellkonstruktionen, bei denen die Universalität durch von Wechselwirkungskonstanten oder sogar von äußeren Störungen abhängende Exponenten verletzt ist³. Solche Fälle sind jedoch experimentell bisher noch nicht gefunden worden und mit hoher Wahrscheinlichkeit in der Natur auch nicht realisiert.

Experimentell läßt sich die Universalität und die (n,d) -Struktur von Exponenten bei kurzreichweitigen Kräften am besten durch das kritische Temperatur-Verhalten des Ordnungsparameters demonstrieren, da die direkte Meßbarkeit des Ordnungsparameters durch die EPR-, NMR- oder PMR-Verfahren zu relativ genauen Meßwerten für β führt:

Bei dreidimensionalen Systemen liefert der Heisenberg-Ferromagnet CrBr_3 als Standardbeispiel für einen Phasenübergang mit drei kritischen Ordnungsparameter-Komponenten den Wert $\beta = 0.368 \pm 0.005$ ⁴. Auch im Rahmen der Fehlergrenzen unterscheidet sich dieser Wert eindeutig von dem bereits 1962 von Heller und Benedek gemessenen $\beta = 0.335 \pm 0.005$ für das antiferromagnetische Ising-System $(n=1)\text{MnF}_2$ ⁵. Weitere Beispiele für $n=1$ sind $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ mit $\beta = 0.335 \pm 0.005$ und $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ mit $\beta = 0.33 \pm 0.01$ ⁶. Für $n=2$ ist das bekannteste Beispiel das Bose-System He^4 mit $\beta = 0.354 \pm 0.01$ ⁷. Die Liste der 3-dimensionalen Systeme, die in diese drei Klassen fallen, läßt sich noch sehr erweitern. Für jedes n gibt es nach der moderneren Theorie noch weitere Differenzierungen, und zwar nach gewissen

Symmetrien im Raum des Ordnungsparameter-Feldes; die entsprechenden Unterschiede in den Exponenten sind oft klein und damit experimentell schwer auflösbar und im übrigen sind auch in günstigeren Fällen viele Experimente noch nicht durchgeführt worden. Es gibt allerdings auch Werte wie $\beta = 0.29 \pm 0.01$ für $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ und $\beta = 0.295 \pm 0.005$ für $\text{CoBr}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ mit $n=1$ in beiden Fällen, die in keine der theoretisch bekannten Universalitätsklassen fallen. Die Erklärung dafür ergibt sich aus der ausgeprägten Schichtstruktur beider Materialien, die den Trend von $\beta=0.33$ zum exakt bekannten Wert $\beta=1/8$ des zweidimensionalen Ising-Modells bewirkt. Es ist sehr schwer, exakt zweidimensionale Schichten oder Filme herzustellen, so daß die kritischen Exponenten meist auf ein Übergangsverhalten, das als crossover bezeichnet wird, zwischen $d=3$ und $d=2$ hindeuten. Wir werden später weitere Beispiele für crossover-Verhalten besprechen, mit dem man allgemein Übergänge zwischen verschiedenen Typen kritischen Verhaltens bezeichnet.

Die Meßwerte des Exponenten β dürfen ebenso wie die eines jeden anderen Exponenten stellvertretend für die Gesamtheit der Exponenten, dh. den Typ des kritischen Verhaltens, eines Systems betrachtet werden. Nach der experimentellen Erfahrung stimmen nämlich zwei Systeme, die in einem Exponenten übereinstimmen, dann auch in allen anderen überein. Darüberhinaus existieren einfache theoretische Relationen zwischen jeweils drei und in Sonderfällen auch zwischen nur zwei kritischen Exponenten. Auf diese sogenannten Skalengesetze werden wir im Rahmen der Skalentheorie (s.II) noch genauer eingehen.

Zur experimentellen Bestimmung kritischer Exponenten sei gesagt, daß eine gewisse Problematik in der Ausnutzung des vollen Gültigkeitsbereichs des entsprechenden Potenzgesetzes und damit einer maximalen Anzahl von Meßpunkten liegt. Im allgemeinen wird so weit wie möglich der gesamte kritische Bereich benutzt, der sich sowohl in der geordneten wie in der ungeordneten Phase von der kritischen Temperatur T_c , die durch Extrapolation der Meßpunkte bestimmt wird, bis zu dem sogenannten Molekularfeld (MF)-Bereich (s.II) erstreckt, in dem das führende Potenzverhalten durch die Exponenten $\gamma=1$, $\nu=1/2$, $\alpha=0$, $\delta=3$, $\eta=0$ und $\beta=1/2$ charakterisiert ist. Die Breite des kritischen Bereichs kann mit ca. 10°K beim strukturellen Phasenübergang von SrTiO_3 mit $T_c=105.5^\circ\text{K}$ ⁸ recht groß sein, während

sie beispielsweise bei Supraleitern im allgemeinen als Folge der langreichweitigen Wechselwirkung sehr klein ist. In den meisten Fällen ist der crossover zwischen kritischem - und MF-Bereich deutlich sichtbar und verunsichert daher die Bestimmung der Exponenten weniger wie der auf der Extrapolation beruhende Fehler in der Lokalisierung von T_c . Noch problematischer sind eventuelle weitere crossover innerhalb des kritischen Bereichs etwa als Folge einer sehr großen Amplitude des für $T \rightarrow T_c$ zweitführenden Terms. Diese crossover sind ebenso wie die Beimischung von relativ großen Korrektur-Beiträgen experimentell schwer zu identifizieren, wenn sich die Exponenten des führenden und des zweitführenden Potenzverhaltens nur wenig unterscheiden. Fisher⁹ hat dafür das interessante Beispiel der Ferromagnete diskutiert, bei denen die Dipol-Dipol-Wechselwirkungen auf ein typisch dipolartiges kritisches Verhalten führen, dessen Exponenten aber experimentell nicht von den oben erwähnten Heisenberg-Exponenten unterschieden werden können. Dem Experiment direkt zugänglich sind dagegen crossover zwischen Ising-, XY- und Heisenberg-Verhalten, die bei den strukturellen Phasenübergängen einiger Perovskite unter der Einwirkung von äußerem uniaxialem Druck zustandekommen. Quantitativ kann der crossover durch das Potenzgesetz $p \propto (T - T_c)^\varphi$ beschrieben werden, wobei p der Druck und φ der direkt meßbare und theoretisch bestimmbare (s.III) crossover-Exponent ist. Man kann mit crossover-Exponenten aber nicht nur Übergänge zwischen verschiedenen Typen kritischen Verhaltens, dh Phasenübergängen 2. Ordnung, sondern auch zwischen diesen und Phasenübergängen 1. Ordnung beschreiben. Im Gegensatz zu denen von zweiter Art sind die Phasenübergänge 1. Art durch eine Diskontinuität des Ordnungsparameters bei der kritischen Temperatur T_1 charakterisiert. Außerdem tritt kein divergentes Verhalten mehr auf. Bei fast kontinuierlichen Phasenübergängen 1. Ordnung, die in der Natur häufig realisiert sind, tritt näherungsweise kritisches Verhalten auf und die Verwendung kritischer Exponenten ist weiterhin sinnvoll. Jedoch muß man berücksichtigen, daß das führende Potenzverhalten für $T \rightarrow T_1$ nie auch nur asymptotisch exakt werden kann. Im Prinzip kann sogar ein im Temperaturverhalten nichtführender Term bei T_1 den dominierenden Beitrag ergeben, wenn nur seine Amplitude groß genug ist.

Zur Bestimmung der Ordnung eines Phasenübergangs kann man zunächst auf die Landau-Theorie¹ zurückgreifen. Diese berücksichtigt zwar nicht mehr Fluktuationsbeiträge wie die Molekularfeld-Näherung, jedoch treffen ihre Prognosen bei allen bekannten physikalischen Systemen zu. Ein Gegenbeispiel ergibt sich aus einer die kritischen Fluktuationen besser berücksichtigenden Theorie für hyperkubische Modelle mit mehr als vier Komponenten, was nicht verwunderlich ist, weil die Fluktuationen mit n anwachsen (s.III).

Die prinzipiellen Schwierigkeiten der Theorie sind bei der Bestimmung der Ordnung eines Phasenübergangs dieselben wie bei der der kritischen Exponenten, denn es gilt der folgende Satz:

Eine Störungstheorie im üblichen Sinne existiert am Phasenübergang nicht, denn es ist das Wesen der kritischen Fluktuationen, die Größe der Entwicklungsterme mit deren Ordnung anwachsen zu lassen (siehe z.B. Ref.10).

Es ist das Verdienst der Renormierungsgruppen-Formulierung von Wilson¹¹, den Weg zu natürlichen und kleinen Entwicklungsparametern im kritischen Bereich gewiesen zu haben. Diese Parameter, in den meisten Fällen sind dies $\epsilon=4-d$ und $1/n$, ermöglichen über das Renormierungsgruppen-Verfahren hinaus eine direkte Diagrammentwicklung mit noch größeren Anwendungsmöglichkeiten. Die Diagrammtheorie liefert bei geeigneter Renormierung das oben diskutierte Potenzverhalten physikalischer Größen mit nach beziehungsweise nach $1/n$ entwickelten kritischen Exponenten^{12,13}.

Glücklicherweise lassen sich viele Vorhersagen dieser Theorie experimentell prüfen und zum anderen führt das Eigenleben der Theorie auf neue experimentelle Fragestellungen. Wir wollen diese sogenannte Wilson-Theorie auf einige charakteristisch voneinander verschiedene Modelle physikalischer Systeme anwenden, welche stellvertretend für eine große Anzahl zur gleichen Universalitätsklasse gehörender Systeme stehen. Das Ziel ist die Konkretisierung und Weiterentwicklung des vorher diskutierten Bildes von der Statik der kritischen Phänomene.

Im ersten Modell betrachten wir nichtferroelektrische Perowskite der Struktur ABO_3 , insbesondere $SrTiO_3$, in der Nähe ihrer Instabilität gegenüber Rotationen der BO_6 -Oktaeder im einfach - kubischen

Gitter der A-Atome. Dieser Phasenübergangstyp konnte erstmals von Müller im Jahre 1958 bei SrTiO_3 nachgewiesen werden¹⁴. Raman-Experimente von Fleury et al¹⁵ führten zum Nachweis der Einheitszellen-Verdopplung mit einer in der R-Ecke der Brillouin-Zone weich werdenden Phononen-Anregungsenergie (siehe Fig.1 und Fig.2). Die Raumgruppe des druckfreien SrTiO_3 in der geordneten Phase wurde 1967 von Unoki und Sakudo durch EPR-Messungen als $14/m\bar{3}m$ bestimmt¹⁶. Unter äußerem Druck in (111)-Richtung tritt eine weitere Tieftemperaturphase auf, die von trigonaler Symmetrie ist ($R3c$). Die Koexistenzkurve wurde von Müller et al mittels EPR bestimmt¹⁷ (s.Fig.3). Sie beschreibt einen Phasenübergang erster Ordnung zwischen den beiden Tieftemperaturphasen bei einem kritischen Druck. Von besonderem Interesse ist der kritische Punkt mit verschwindendem Druck, da die Koexistenzkurve dort einen crossover von Phasenübergängen diskontinuierlicher Art zu echt kritischem Verhalten beschreibt. Der entsprechende crossover-Exponent wurde von Aharony und Bruce berechnet¹⁸. Wir haben den crossover-Exponenten und crossover-Bereich in der ungeordneten Phase bestimmt^{19,20}, womit Übergänge zwischen verschiedenem kritischem Verhalten entlang der kritischen Linie 2. Ordnung beschrieben werden. Diese crossover ergeben sich aus druck-induzierten Aufspaltungen der in dem druckfreien Fall bei $q_R=(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ dreifach entarteten soft modes in der ungeordneten Phase. Die theoretische Grundlage für diesen Sachverhalt ergibt sich aus dem Oktaeder-Rotationsmodell von Thomas und Müller²¹. Wir haben zur Veranschaulichung die Zwangsbedingung, daß alle Sauerstoff-Atome zu je zwei benachbarten Einheitszellen gehören und sich daher nur auf den Kubenflächen bewegen können, in Fig. 4 besonders hervorgehoben, denn sie ermöglicht nur so kleine Ordnungsparameter, nämlich Drehwinkel bis zu 2° , so daß die Q_i in guter Näherung proportional zu den Drehwinkeln sind. Für das kubische SrTiO_3 , auch LaAlO_3 , KMnF_3 etc., kann man den klassischen Hamiltonian sofort mit Hilfe der kubischen Invarianten in den Q_i hinschreiben. Die Wechselwirkung zwischen den benachbarten Zellen k und k' ist von der Form $\sum_{\alpha, k+k'} Q_{\alpha k} Q_{\alpha k'}$, und kann durch Entwicklung als lokale Wechselwirkung in der Form $Q_{\alpha}^2(x) + (\nabla Q_{\alpha}(x))^2$ geschrieben werden. Das Einteilchen-Potential lautet nach Slonczewski und Thomas^{22,23} bei zusätzlicher Kopplung zwischen den Verzerrungskomponenten $e_i, i=1\dots 6$ an die $Q_{\alpha}, \alpha=1\dots 3$

einerseits und an die Komponenten des Spannungstensors $T_i, i=1\dots 6$ andererseits

$$U = \frac{1}{2} K Q^2 + A(Q^2)^2 + A_n \sum_{i,j} Q_i^2 Q_j^2 - B_e \sum_{i=1}^3 e_i (3Q_i^2 - Q^2) - B_t (e_4 Q_2 Q_3 + e_5 Q_3 Q_1 + e_6 Q_1 Q_2) + \frac{C_{11}}{2} \sum_{i=1}^3 e_i^2 + C_{12} \sum_{i,j} e_i e_j + \frac{C_{44}}{2} \sum_{i=4}^6 e_i^2 - \sum_{i=1}^6 e_i T_i \quad (1)$$

Durch Minimisierung dieses Potentials bezüglich der e_i werden diese eliminiert und man erhält

$$U = \frac{1}{2} K Q^2 + A(Q^2)^2 + A'_n \sum_{i,j} Q_i^2 Q_j^2 - B_e (C_{11} - C_{12})^{-1} \sum_{i=1}^3 T_i (3Q_i^2 - Q^2) - B_t C_{44}^{-1} (T_4 Q_2 Q_3 + T_5 Q_3 Q_1 + T_6 Q_1 Q_2) \quad (2)$$

Bei (III)-Druck ist der Spannungstensor durch $T_i = -p/3$ für $i=1\dots 6$ und bei (100)-Druck durch $T_i = -p\delta_{i1}$ gegeben. Der Haupteffekt eines beliebig anisotropen Drucks besteht dann offenbar in der anisotropen Renormierung des Koeffizienten K des harmonischen Potentialanteils. Die resultierende sogenannte axiale Anisotropie bewirkt die Aufhebung der Entartung der Γ_{25} -modes.

In Kap. III werden wir das crossover-Verhalten bezüglich anisotropen Drucks anhand eines auf (2) basierenden allgemeineren Modells mit m leichten (kritischen) und $(n-m)$ -schweren (fast-kritischen) Ordnungsparameter-Komponenten untersuchen. Die verschiedenen Suszeptibilitätskomponenten werden im Detail berechnet und neben kritischen Exponenten und Amplituden auch auf typische nichtuniverselle Eigenschaften untersucht.

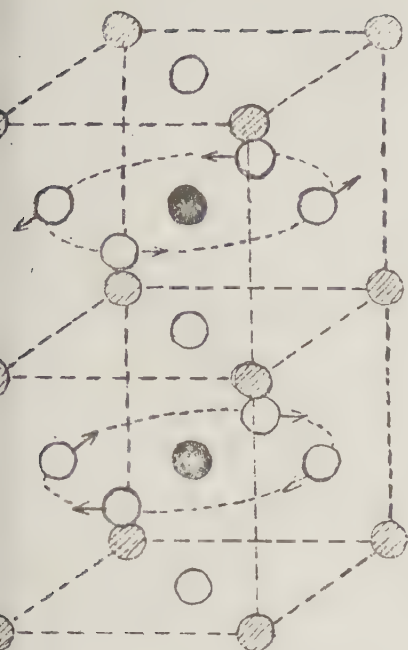
Unsere zweite Modell-Gruppe umfaßt 1. kompressible Magnete, 2. Modelle mit Strukturumwandlungen vom order-disorder Typ mit Kopplung an ein kompressibles Gitter und 3. das BEG-Modell^{24,25} für He^3 - He^4 -Mischungen.

Wir interessieren uns darunter speziell für das axial anisotrope Verhalten des bei 242.8°K sich strukturell umordnenden Ammoniumchlorids²⁶⁻²⁸. Wie Fig. 5 zeigt, gibt es bei NH_4Cl zwei äquivalente Orientierungen der Ammoniumionen im einfach kubischen Chlor-Gitter. Während die Besetzung der beiden Orientierungsmöglichkeiten in der ungeordneten Phase willkürlich ist, bevorzugen NH_4^+ -Tetraeder für $T < T_c$ dieselbe Ausrichtung. Die beiden Einstellmöglichkeiten der Tetraeder können durch einen Pseudospin (Quantenzahl $1/2$) beschrieben werden, weshalb das Verhalten pseudo-magnetisch ist. Dieser strukturelle Phasenübergang kann nicht wie der bei SrTiO_3 vom displaziven Typ sein. Er ist dagegen vom order-disorder Typ²⁹⁻³¹. Während bei

einem displaziven Übergang der harmonische Beitrag des Einteilchenpotentials positiv ist und erst durch die Wechselwirkung zwischen verschiedenen Gitterplätzen Minima bei $Q \neq 0$ erzeugt werden können, liegt bei order-disorder-Modellen infolge eines negativen harmonischen Einteilchenpotentials a priori ein sogenanntes Zweitalmodell wie in Figur 6b vor.

Die geordnete Phase von NH_4Cl hat tetragonale Symmetrie ($P4/mcm$). Die Vermutung, daß das kritische Verhalten von Ammoniumchlorid, dem obigen Modell entssprechend, dem eines Ising-Magneten ähnlich sein sollte, wird durch folgende Experimente widerlegt. Sowohl die Messungen der Zerfallszeit T^P des Ordnungsparameters (Fig.7) als auch der thermischen Expansion des Kristalls³²⁻³⁶ (Fig.8), die nach einer Theorie von Michel^{37,38} miteinander konsistent sind, deuten bei Drucken von weniger als ca. 1500 atm auf einen Phasenübergang 1. Ordnung hin, der bei einem gewöhnlichen Ising-Modell mit Spin 1/2 nicht auftreten kann. Der diskontinuierliche Charakter des Übergangs zeigt sich auch bei Messungen der piezoelektrischen Konstanten³⁹. Wie man in den Figuren 7 und 8 erkennen kann, wird der Phasenübergang oberhalb eines bestimmten, trikritisch genannten, Druckes kontinuierlich. Die relativ starke Druck-Abhängigkeit der thermischen Expansion führt zu der Vermutung, daß die Kompressibilität des Kristalls und die Kopplung der Spins an Gitter-Freiheitsgrade den Charakter des Phasenübergangs wesentlich beeinflussen. Diese Frage hat zu einer großen Zahl verschiedener Theorien geführt⁴⁰⁻⁴⁷. Von Horner⁴² wurde unter Berücksichtigung der indirekten Spin-Phonon Wechselwirkung in harmonischer Näherung ein einkomponentiges Modell mit 6-Spin-Potential abgeleitet, das in qualitativer Hinsicht die gleichen druck-induzierten Übergänge zwischen diskontinuierlichem-, trikritischem- und kontinuierlich kritischem Verhalten wie bei NH_4Cl zeigt. Eine neuere Theorie von Aharony⁴⁸, die auf dem Wagner-Swift Hamiltonian⁴⁰ aufbaut, erklärt unter Berücksichtigung der kritischen Fluktuationen mittels Renormierungsgruppe die Möglichkeit diskontinuierlichen Verhaltens im druckfreien Fall. Wir haben Aharony's Modell für beliebigen äußeren Druck p verallgemeinert⁴⁹, was durch die folgende Hamilton-Funktion gegeben ist:

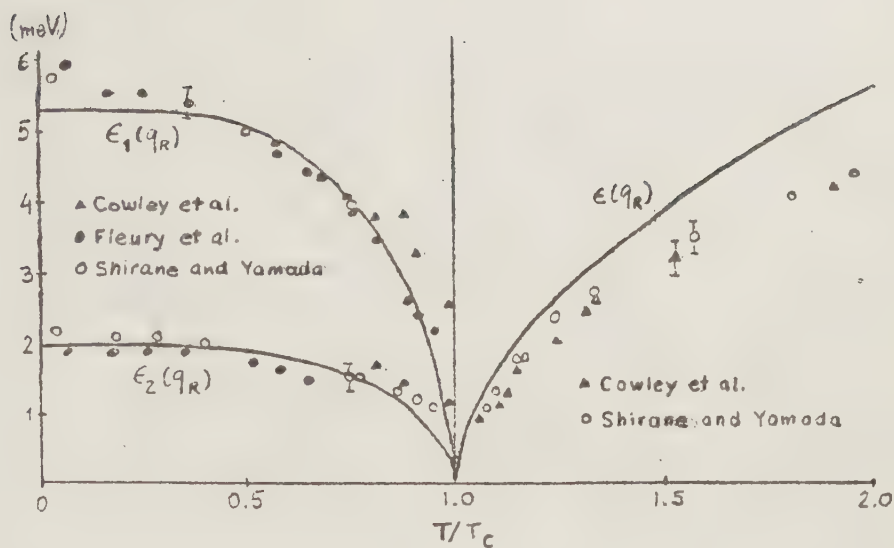
$$\mathcal{H}/T = \frac{1}{2} \int_x \sum_{\alpha} \left[r_{0\alpha}(p) S_{\alpha}^2(x) + (\nabla S_{\alpha}(x))^2 \right] + u_0 \int_x \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \right)^2 + v_0 \int_x \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \right)^3 - H \int_x S_z(x) \quad (3)$$



● : Sr , ● : Ti , ○ : O

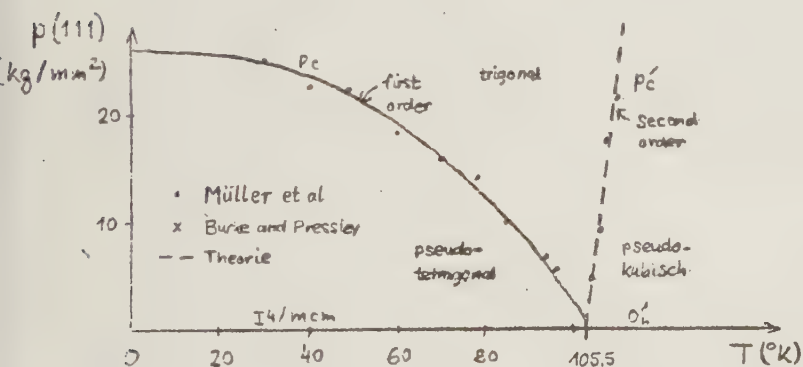
SrTiO_3 - soft mode

Fig. 1



SrTiO_3 - Phononen Energie (Feder und Pytte²¹)

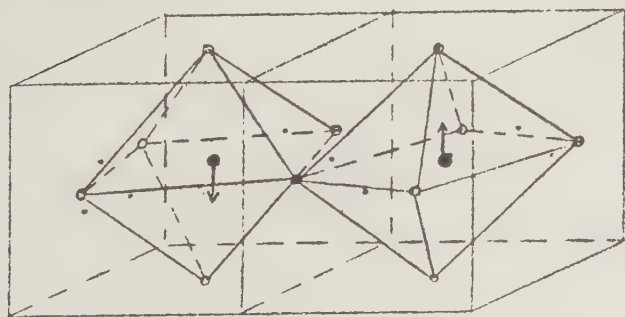
Figur 2



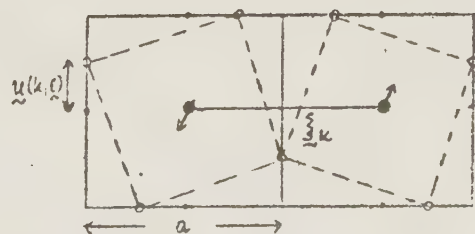
Phasendiagramm von SrTiO_3
mit (111)-Druck-induzierter
trigonaler Phase

Figur 3

Oktaeder-Rotations Modell (Thomas):

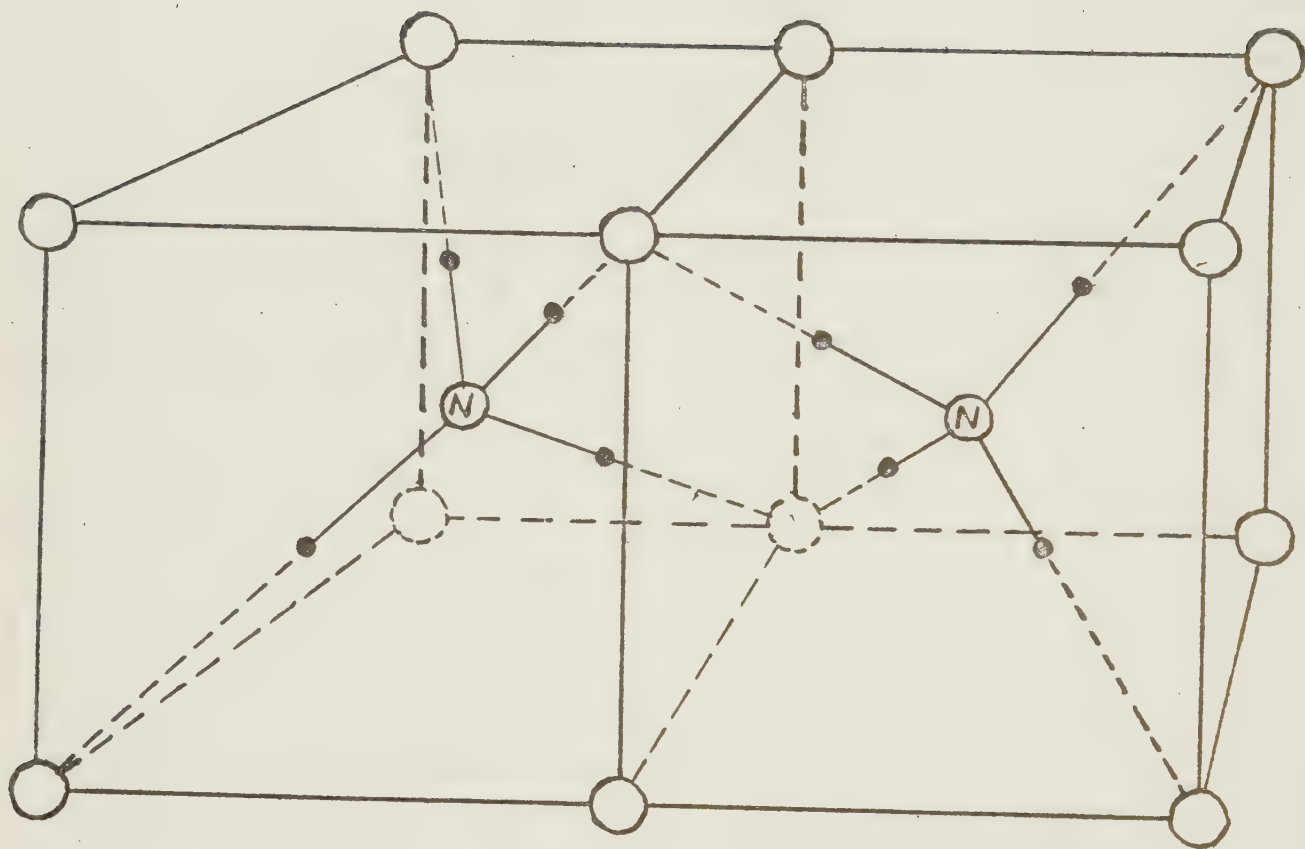


● : Ti , ○ : O im Sr-Gitter



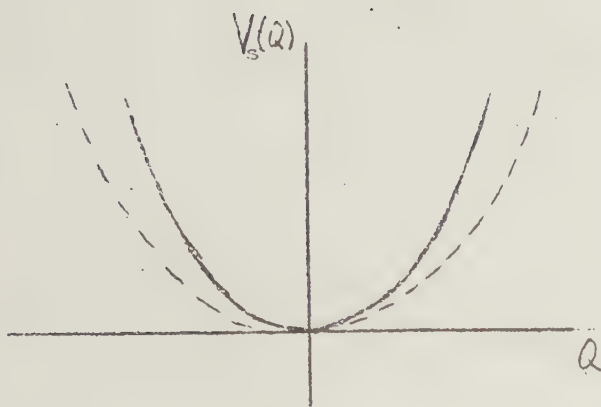
$$\underline{u}(\underline{k}, \underline{\ell}) = \frac{a}{2} \underline{\xi}_{\underline{k}} \times (\underline{Q}(\underline{\ell} + \underline{\xi}_{\underline{k}}) - \underline{Q}(\underline{\ell}))$$

Figur 4

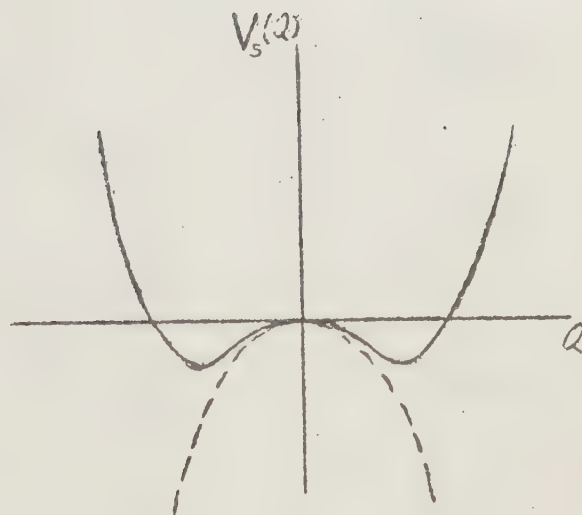


○:Cl , •:H , ⊗:N

Fig.5



6a: displaziver Typ
($\text{SrTiO}_3, \dots$)



6b: order-disorder Typ
($\text{NH}_4\text{Cl}, \dots$)

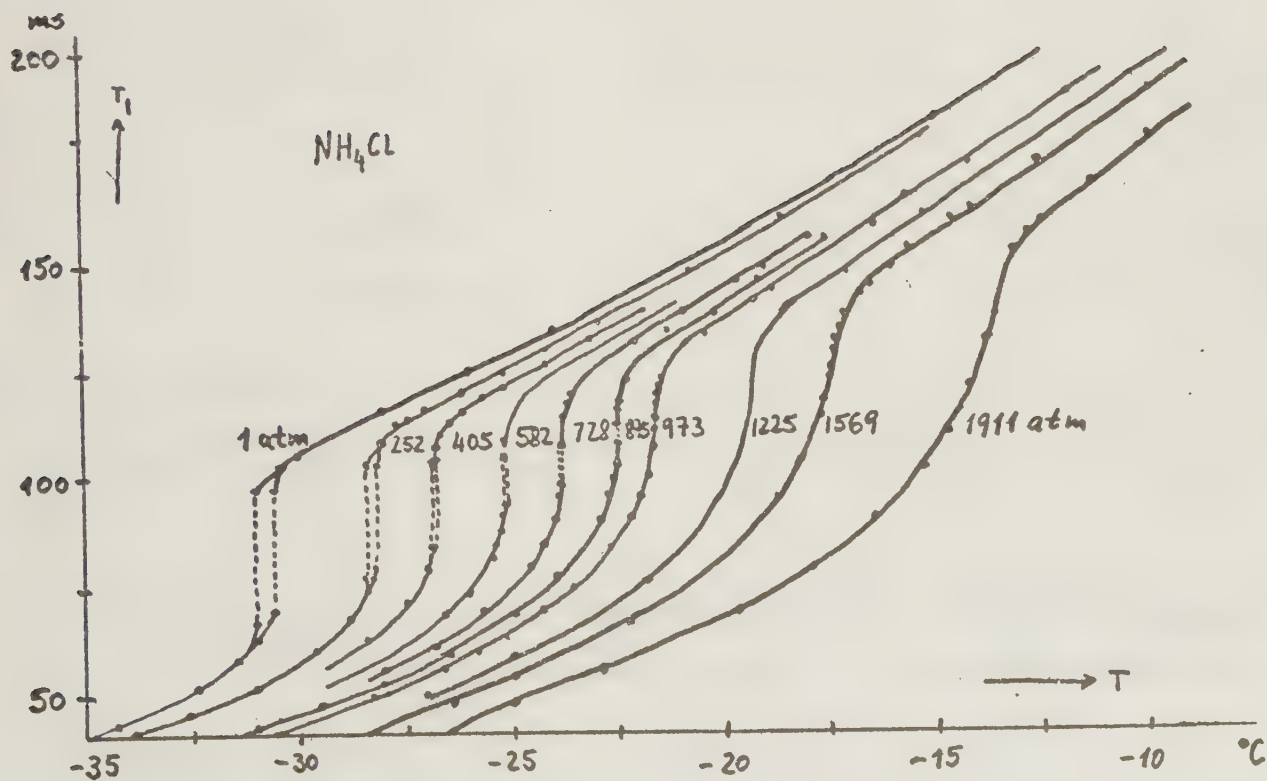
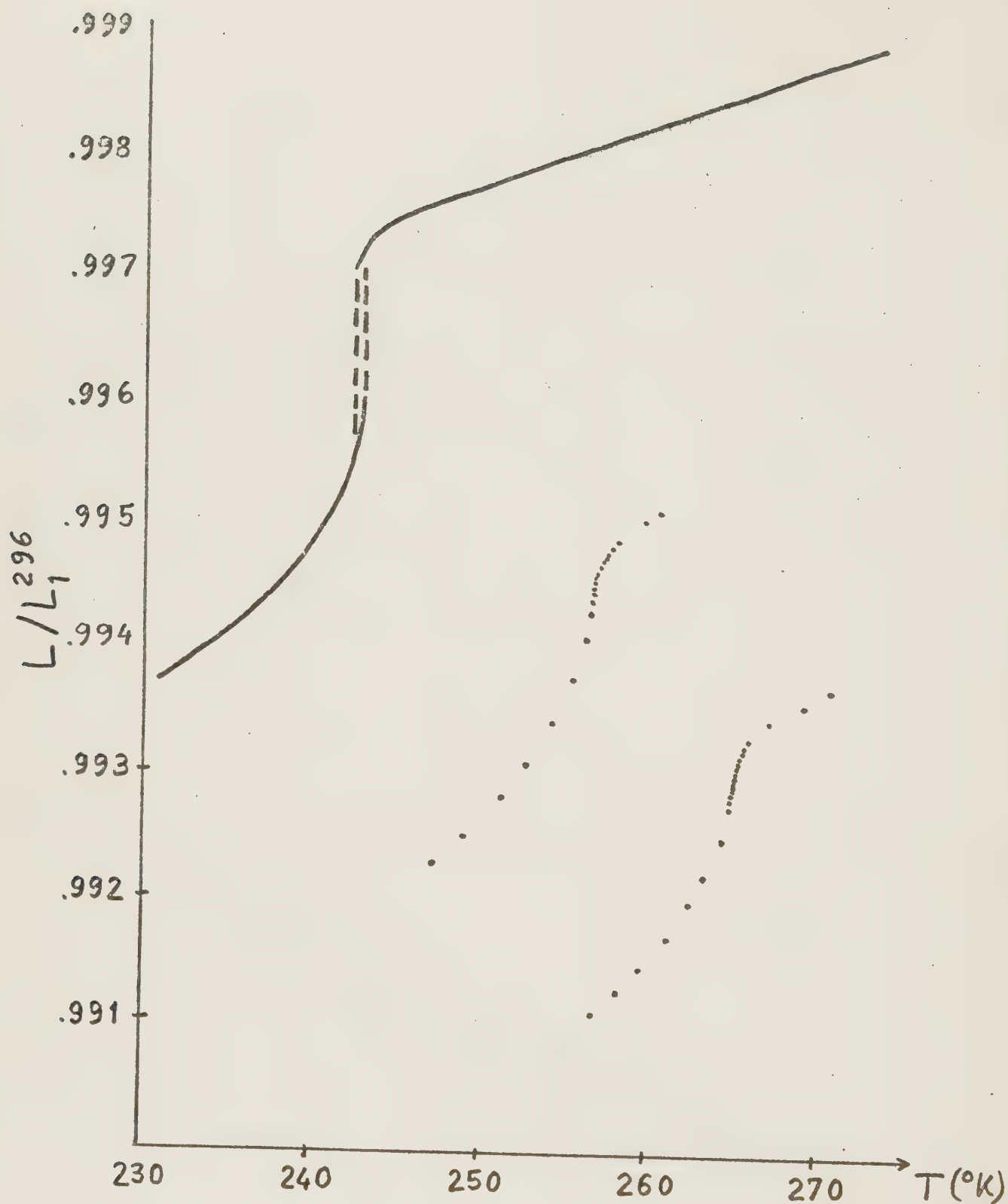


Fig. 7

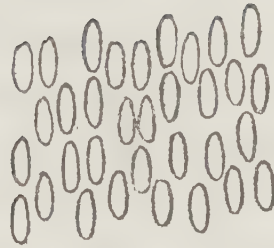


thermische Expansion des NH_4Cl -Kristalls unter
verschiedenen Drucken (nach Garland und Weiner^{33,34})

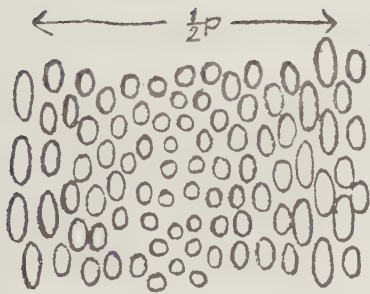
Fig. 8



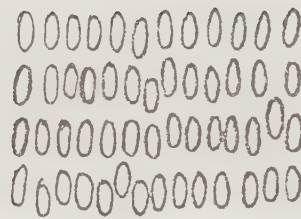
1. isotrope Phase



2. nematische Phase

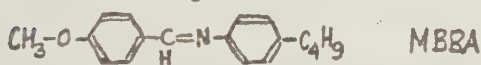
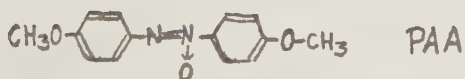


3. cholesterische Phase
mit Periodizitätsabstand $P/2$



4. Smektisch A Phase

die vier grundlegenden Strukturen flüssiger Kristalle aus identischen Molekülen

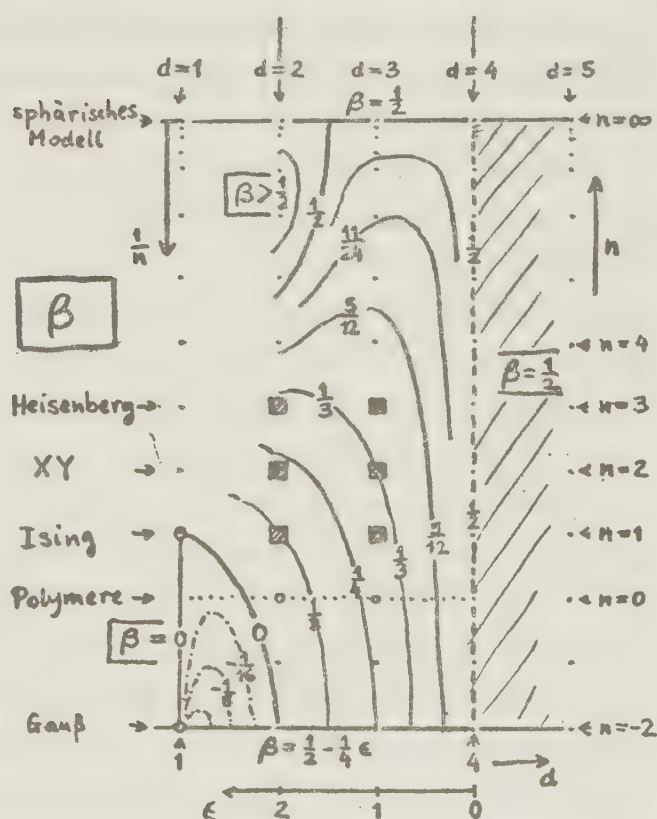
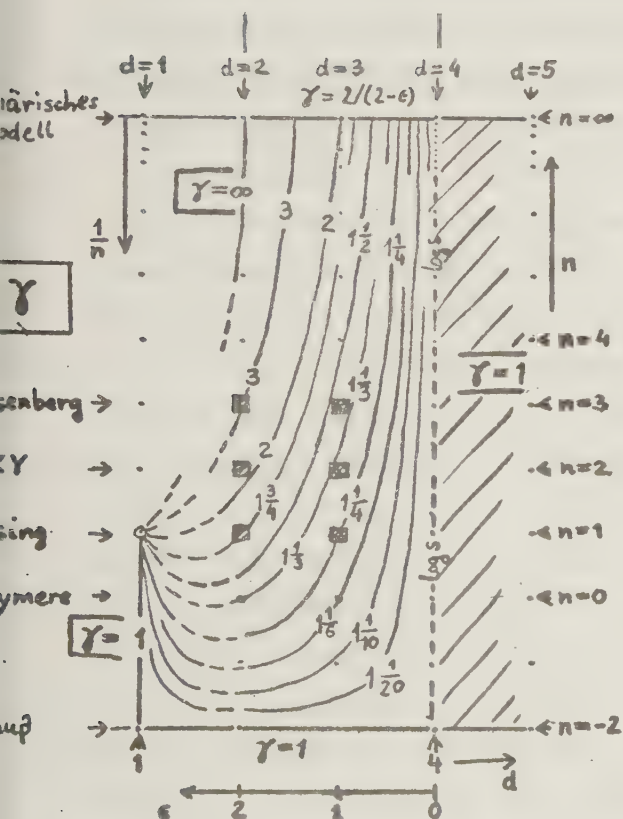
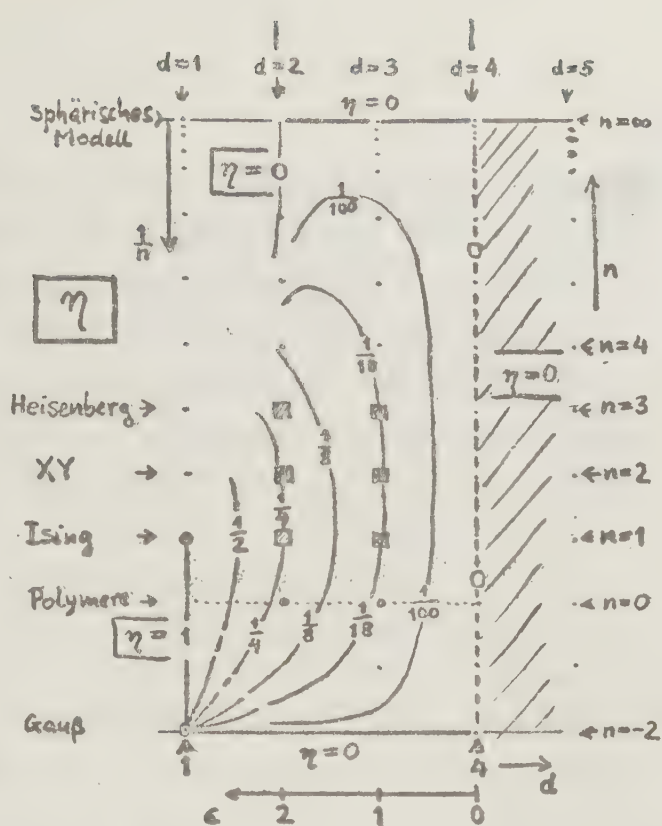
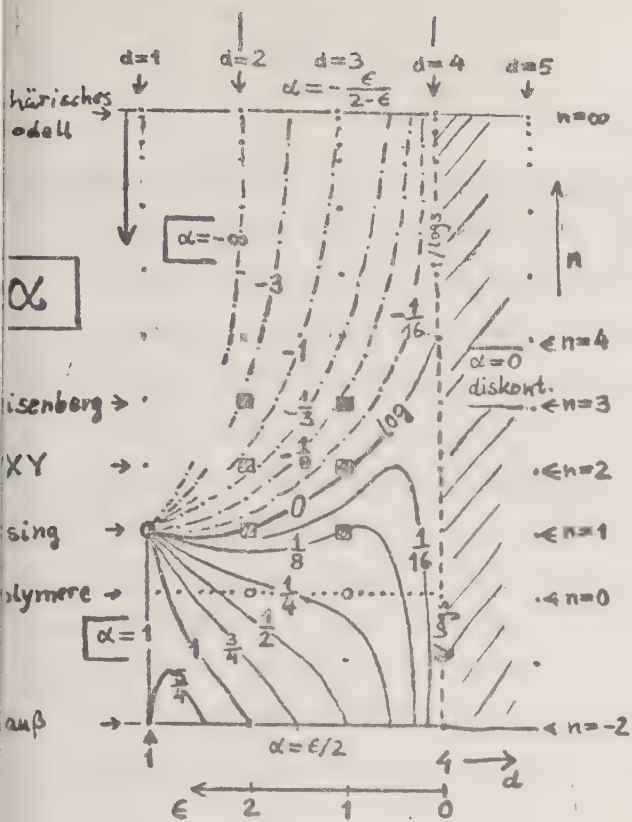


(nach Stephen, Straley⁵⁵)

Figur 9

Mit diesem Modell lassen sich (ebenfalls qualitativ) die verschiedenen Typen kritischen Verhaltens von NH_4Cl einschließlich des crossover-Verhaltens und der kritischen Exponenten ableiten und diskutieren (siehe dazu Kap. III).

Die dritte Modell-Gruppe von direkter physikalischer Relevanz läßt sich durch exakt dreizählige Symmetrie im Spinraum formal charakterisieren. Unter diese Kategorie fallen Systeme wie die Doppel-Perowskite $\text{Me}(\text{Cu}_x\text{Zn}_{1-x})\text{WO}_6$ mit $\text{Me}=\text{Ba}, \text{Sr}$, die Jahn-Teller induzierte Phasenübergänge zeigen⁵⁰⁻⁵⁴. Bei einer J-T induzierten Symmetrieänderung von einem kubischen zu einem tetragonal verzerrten Kristall läßt sich das Einteilchenpotential der Oktaeder-Komplexe durch nur zwei Normalkoordinaten Q_2 und Q_3 ausdrücken⁵⁴. Dieses Einteilchenpotential besitzt C_{3v} -Symmetrie im (Q_2, Q_3) -Raum. Die Wechselwirkung benachbarter Oktaeder kann am Phasenübergang durch Ableitungen der Normalkoordinaten lokal formuliert werden. Ein ähnliches Modell ergibt sich für flüssige Kristalle, die einen Phasenübergang von einer isotropen Verteilung der länglichen Moleküle zu einer nematischen Ordnung derselben aufweisen⁵⁵. Die Existenz langer Molekülachsen ist typisch für die Bestandteile flüssiger Kristalle. Dann lassen sich, wie in Figur 9 gezeigt, vier prinzipiell voneinander verschiedene Phasen flüssiger Kristalle aufzählen: neben der ungeordneten oder isotropen Phase existiert die nematische Phase, in der die Richtungen der (langen Achsen der) Moleküle, jedoch nicht ihre Schwerpunkte, langreichweitige korreliert sind; dies gilt genauso für die cholesterische Phase, jedoch rotiert die Vorzugsrichtung periodisch im Raum, während sie bei der nematischen Phase homogen ist; die smektische Phase, bei der man mit dem Zusatz A bis H besonders viele Varianten unterscheidet, ist offenbar durch eine der Orientierungsordnung überlagerte Schichtstruktur charakterisiert. Unter einer großen Zahl verschiedener Phasenübergänge war besonders der zwischen der nematischen und der smektisch A Phase theoretisch stark beachtet und untersucht worden^{56,57}, da er bezüglich Typ-I Supraleitern isomorphes kritisches Verhalten zeigt. Wir interessieren uns hier speziell für isotrop-nematische Übergänge. Standardbeispiele hierfür liefern die organischen Verbindungen PAA und MBBA, die von Stephen und Straley behandelt wurden⁵⁵. Statische Eigenschaften wie die große magnetische Doppelbrechung in der isotropen Phase von PAA nahe dem Phasenübergang zur nematischen Struktur⁵⁸ sowie dynamische



Niveau Linien der Exponenten α , η , γ und β (nach Fishier⁹)
 noch nicht eingezeichnet sind die kürzlich (theoretisch) entdeckten physikalischen Punkte bei $n=4$ (NbO_2)⁶⁷
 und $n=8$ (Typ I Antiferromagnet) ⁶⁸)

Figur 10

Effekte wurden erstmals durch ein theoretisches Modell von de Gennes erklärt^{59,60}. Dieses Modell benutzt als Ordnungsparameter einen symmetrischen Tensor $Q_{\alpha\beta}$ mit der Spur null. Mit Hilfe des sogenannten Direktors n , der die Vorzugsrichtung der langen Molekülachsen in einem uniaxialen flüssigen Kristall angibt, läßt sich der Ordnungsparameter schreiben als $Q_{\alpha\beta} = Q(n_\alpha n_\beta - \delta_{\alpha\beta}/3)$, wobei Q die Differenz zwischen paralleler und senkrechter Suszeptibilität bezeichnet. Wählt man den Direktor entlang einer der Hauptachsen, so verbleiben wegen der verschwindenden Spur bei einem 3×3 -Tensor $Q_{\alpha\beta}$ nur zwei unabhängige Diagonalelemente. Bezeichnet man diese beiden Variablen mit S_1 und S_2 , so reduziert sich das Modell von de Gennes auf das sogenannte Potts-Modell⁶¹ mit drei Zuständen, dessen kontinuierliche Form durch die folgende Hamilton-Funktion gegeben ist:

$$\beta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_x \left(r_0 \sum_{\alpha=1}^2 S_\alpha^2(x) + (\nabla S_\alpha(x))^2 \right) + \frac{u_0}{4!} \int_x \left(\sum_{\alpha} S_\alpha^2(x) \right)^2 - \frac{u_3}{3} \int_x (S_1^3(x) - 3 S_1(x) S_2^2(x)) \quad (4)$$

Die dreizählige Symmetrie (C_{3V}) von $\beta \mathcal{H}$ bezüglich Drehungen im (S_1, S_2) -Raum resultiert aus der Invarianz der Energie unter der Vertauschung der drei Hauptachsen. Schließlich resultiert die dreizählige Symmetrie des Hamiltonians bezüglich dieser beiden Feldvariablen aus der Invarianz der Energie unter der Vertauschung der drei Hauptachsen. Die für die feldtheoretische Behandlung praktischste Formulierung für solche isotrop-nematischen Phasenübergänge ist dann durch die kontinuierliche Version des sogenannten Potts-Modells⁶¹ mit drei Zuständen gegeben. Wir haben für ein verallgemeinertes Potts-Modell (siehe Kap. III und Ref. 62), das aus $n/2$ gekoppelten zweikomponentigen Potts-Modellen besteht, zeigen können, daß der Phasenübergang für alle positiven n und in weniger als 6 Dimensionen ($d < 6$) stets von erster Ordnung ist. Dies war bereits durch die Landau-Theorie vorhergesagt, jedoch nach Berücksichtigung weiterer kritischer Fluktuationen kontrovers diskutiert worden^{63, 64}, wobei Alexander⁶³ die Möglichkeit eines kontinuierlichen Phasenübergangs behauptet hatte. Wir haben außerdem wichtige Eigenschaften des diskontinuierlichen Phasenübergangs wie Breite des kritischen Bereichs, Sprung des Ordnungsparameters oder Skalenverhalten der transversalen Suszeptibilität untersucht⁶² (s. III). Diese Resultate sind auf die oben beschriebenen isotrop-nematischen beziehungsweise

Jahn-Teller induzierten Phasenübergänge anzuwenden. In Referenz 64 wurde auch die Anwendbarkeit des Potts-Modells auf strukturelle (martensitische) Übergänge bei A15-Verbindungen^{65,66} erwähnt.

Die oben beschriebenen drei großen Gruppen von physikalisch interessanten Modellen können als die Kernpunkte der Abschnitte III.1, III.3 und III.4 betrachtet werden. Die feldtheoretischen Methoden, die wir benutzen werden, sind unter der Überschrift Wilson-Theorie in II.4 dargestellt. Außer der Polyakov-Theorie, die wir der Zweckmäßigkeit halber in III.4 ausnutzen werden, stellen die Abschnitte III.1 bis 3 einen Vorspann zur Wilson-Theorie dar. Diese Theorie erfordert eine kontinuierliche Verallgemeinerung der Dimension d bzw. der Anzahl der Ordnungsparameter-Komponenten und führt somit auf Resultate in einem mathematischen Raum, in dem die physikalischen Systeme lediglich durch einzelne Punkte gegeben sind. Daß gerade aber das vollständige mathematische Bild der Phasenübergänge physikalisch relevant ist, kommt zum Beispiel in den in Figur 10 wiedergegebenen Niveaulinien-Zeichnungen für kritische Exponenten im (n,d) -Raum⁹ zum Ausdruck. Die Systematik des mathematischen Bildes wird uns auch auf einige interessante Zusammenhänge zwischen den in III.1 bis 4 untersuchten Modellen führen.

II. Methoden zur Behandlung kritischer Phänomene

1. exakt lösbare Modelle

Die Anzahl der exakt lösbaren Modelle, die einen Phasenübergang zeigen, ist in letzter Zeit stark im Wachsen begriffen^{3,69-73}.

Interessiert man sich wie wir in dieser Arbeit aber speziell für Entwicklungen um exakte Lösungen, um im Rahmen der Wilson-Theorie in einem anderen, nämlich physikalisch interessanten Parameter-Bereich, Informationen zu erhalten, so kommt nur eine kleine Anzahl von ca. 5 Modellen⁷⁴⁻⁷⁹, die wir im Folgenden diskutieren wollen, in Frage. Die Gründe sind einerseits technischer Art, andererseits läßt oft die starke Beschneidung der Physik eines Modells zum Zwecke seiner exakten Lösbarkeit die durch Entwicklung um das Modell angestrebte Fortsetzung auf einen physikalisch interessanten Parameterbereich nicht mehr zu.

Man denke beispielsweise an Modelle mit unrealistischen Kristallgittern resp. Wechselwirkungsmechanismen.

Wir befassen uns im Folgenden mit exakten Lösungen für Modelle, die bis auf die unrealistische Dimensionen n und d (bspw. $n = \infty$ oder $d=4$) physikalisch sind und deren Vorteil darin besteht, daß man durch Entwicklungen um diese Lösungen Aussagen über physikalische Systeme mit $n=0\dots 8$ und $d=1\dots 3$ gewinnen kann (s.Kap.III).

An allererster Stelle muß man dabei die sogenannte Molekularfeldapproximation (MFA)^{74,75} nennen, die Modellcharakter hat, jedoch nicht konsistent durch einen Hamiltonian definiert werden kann. Der Modellcharakter läßt sich dadurch belegen, daß die MFA in den Aussagen über kritische Exponenten und die Form des nach der Magnetisierung entwickelten Helmholtz-Potentials mit denen des Landau-Modells⁸⁰ (s.Ref.1) übereinstimmt. Die MFA besitzt folgende Vorzüge: 1. das MF-Konzept, die komplizierten Wechselwirkungsmechanismen zwischen verschiedenen Gitterplätzen eines Kristalls durch separierte Einteilchenprobleme jeweils eines Gitterpunktes in einem selbstkonsistent gemittelten Molekularfeld zu beschreiben, läßt sich bei allen kritischen Phänomenen anwenden und fast immer exakt lösen; 2. experimentell nachgewiesen ist bei realen Systemen mit $d=3$, $1 \leq n \leq 3$, daß das MF-Modell das Verhalten in einem nichtkritischen Bereich, der um einige Prozent (10 Grad bei SrTiO_3) von der kritischen Temperatur entfernt ist, nahezu exakt beschreibt; hinzu kommt, daß die MF-Exponenten näher bei den tatsächlichen Meß-

werten liegen als diejenigen irgendeines anderen exakt lösbaren Modells; 3. beschreibt die MF-Lösung die Ordnung des Phasenübergangs fast immer richtig. Ein wesentlicher Mangel der MFA (Molekularfeldapproximation) ist allerdings, daß neben der Überschätzung der kritischen Temperatur die experimentell verifizierte und im Rahmen der Universalität zugelassene Abhängigkeit der kritischen Exponenten von der Ortsraum-Dimension d und der Anzahl n der Ordnungsparameter-Komponenten nicht erklärt wird. Der Verlust der n -Abhängigkeit der kritischen Exponenten, wenn auch nicht der Amplituden, geht auf die Approximation der Vielteilchenprobleme durch Einteilchenprobleme zurück, wobei die MF-Entkopplung auch alle Feldvariablen statistisch voneinander unabhängig macht. Die d -Abhängigkeit geht ebenso verloren, da es nach der Entkopplung nur noch auf die Anzahl der nächsten Nachbarn ankommt (wenn die Wechselwirkung genügend kurzreichweitig ist). Plausibel ist, daß die Beschreibung durch ein Molekularfeld umso besser wird je mehr nächste Nachbarn anwesend sind, dh. je größer die Dimension d ist. Tatsächlich wird sich herausstellen, daß die MFA-Exponenten für $d > 4$ exakt sind. Bei $d=4$ sind die MF-Exponenten auch exakt, aber es gibt logarithmische Korrekturen⁸¹. Betrachtet man dann die Näherung für $d=3$, so überrascht es nicht mehr, daß die MFA für $d=2$ schlecht wird. Dies ist an der folgenden Tabelle der kritischen Exponenten abzulesen, in der die Werte des ebenfalls exakt gelösten 2-dimensionalen Ising-Modells⁷⁹ aufgenommen sind:

	γ	ν	η	α	β	
$d=2, n=1$	1.75	1	0.25	$0(\log)$	1/8	(nach Stanley) ¹
MFA zum Vergleich	1	1/2	0	0	1/2	

Über mehrkomponentige 2-dimensionale Modelle gibt es weniger verlässliche Informationen, so z.B. den exakten Nachweis von Mermin und Wagner⁸², daß das ($d=2$)-Heisenberg-Modell keine spontane Magnetisierung besitzt. Entwicklungen um das zweidimensionale Ising-Modell scheinen schwierig und nicht sehr erfolgversprechend zu sein. Wir erwähnen nur die Arbeit von Camp⁷³, der ein d -dimensionales Fermi-Modell konstruiert hat, das für beliebige d die kritischen Exponenten des $d=2$ Ising-Modells besitzt. In der Wilson-Theorie hat sich gezeigt, daß $d=2$ ein Häufungspunkt relevanter Operatoren und damit als Ausgangspunkt für Entwicklungen ungeeignet ist.

Da $d=2$ eine natürliche untere Grenze der feldtheoretischen Wilson-Entwicklungen ist, die man allerdings mitbetrachten sollte, denn die Renormierungsgruppen-Arbeit von Niemeijer und van Leeuwen^{83,84} reproduziert die exakten Ising-Exponenten nahezu exakt (das zweidimensionale XY-Modell wurde inzwischen von Lublin⁸⁵ behandelt), brauchen wir hier auf die Vielzahl exakter Lösungen in $d=1$ nicht einzugehen.

Die historische Entwicklung eines weiteren exakt lösbaren Modells, des sog. sphärischen Modells (SM), ist im Buch von Stanley¹ geschildert. Der Name des Modells illustriert die als 'Kontinuums-Modifikation' des Ising-Modells gedachte Definition, die die Eigenschaft der Ising-Quantenspins $s_i^2=1$ für alle N Gitterplätze i durch die Bedingung $\sum_{i=1}^N s_i^2=N$ ersetzt, so daß die Konfigurationen des Systems auf einer N -dimensionalen Hyperkugel verteilt sind. Das erlaubt natürlich für $N \rightarrow \infty$ beliebig große Spinwerte an einzelnen Gitterplätzen, so daß man sich über die Überschätzung der Singularität der Spinkorrelationsfunktion bei T_c nicht wundern muß. Man vergleiche dazu den gegenüber der MF-Lösung größeren Wert von γ für $d=3$, nämlich $\gamma=2$, was $\chi_{SM} \propto t^{-2}$ statt $\chi_{MF} \propto t^{-1}$ bedeutet. In merkwürdigem Kontrast und doch Zusammenhang (s. dazu Skalentheorie) steht dazu die Verkleinerung des kritischen Exponenten der spezifischen Wärme: $\alpha_{MF}=0 \rightarrow \alpha_{SM}=-1$. Abgesehen von solchen speziellen Punkten ist wesentlich, daß das sphärische Modell d -abhängige Exponenten besitzt, und zwar gilt im Bereich $2 < d \leq 4$

	γ	ν	η	α	β
Exponenten des sphärischen Modells $2 < d \leq 4$	$\frac{2}{d-2}$	$\frac{1}{d-2}$	0	$\frac{d-4}{d-2}$	$\frac{1}{2}$

während für $d > 4$ die SM-Exponenten mit den MF-Exponenten übereinstimmen und der Übergang bei $d=4$ kontinuierlich ist (wenn auch logarithmische Korrekturen auftreten). Joyce⁸⁶ hat darüberhinaus für langreichweitige Wechselwirkungen, ie $V(x) \propto x^{-d-\sigma}$ mit $0 < \sigma < 2$, folgende σ -Abhängigkeit der SM-Exponenten finden können, wobei σ als long-range(LR)-Parameter bezeichnet wird:

γ	ν	η	α	β
$\frac{\sigma}{d-\sigma}$	$\frac{1}{d-\sigma}$	$2-\sigma$	$\frac{d-2\sigma}{d-\sigma}$	$\frac{1}{2}$

Der Übergang zu den MF-Exponenten, die keine σ -Struktur haben, liegt hier bei $\sigma=d/2$. Da das sphärische Modell einige Strukturen des kritischen Bereichs erklärt, darf man annehmen, daß es sich wenn überhaupt speziell für diesen Temperaturbereich eignet, zumal es im nichtkritischen Bereich noch schlechtere Übereinstimmungen mit experimentellen Werten liefert. Eine Verallgemeinerung des sphärischen Modells auf mehrkomponentige Felder mit obigem "constraint" ist wegen der Entkopplung der Komponenten trivial und in mehreren Arbeiten zur Behandlung komplizierter Modelle mit Dipol-Wechselwirkungen benutzt worden⁸⁷⁻⁸⁹. Stanley hat 1968 einen sehr fruchtbaren Beweis geführt, der besagt, daß obiges sphärisches Modell für $N \rightarrow \infty$ mit einem n -Vektor Modell unter der Bedingung $\sum_{\alpha=1}^n s_{\alpha}^2 = n$ im limes $n \rightarrow \infty$ exakt übereinstimmt⁷⁷. Die experimentell bekannte schwache n -Abhängigkeit (im Vergleich zur d -Abhängigkeit) motiviert eine Entwicklung nach $1/n$ um die exakte Lösung bei $n = \infty$. Im Rahmen der im Ortsraum kontinuierlichen Approximation dieses Modells (die kontinuierliche Approximation wird wegen der langreichweitigen Korrelationen in der Nähe von T_c exakt) werden wir in Kap. IV von dieser Entwicklung Gebrauch machen. Es sei noch bemerkt, daß die kontinuierliche Approximation des MF-Modells als Gauß-Modell bekannt ist, welches ebenfalls exakt lösbar ist.

2. Hochtemperatur-Entwicklungen (HTE)

Wir wollen hier nicht auf die Technik der HTE¹ eingehen, da diese Methode zu der feldtheoretischen Beschreibung völlig unkorreliert ist. Gerade deshalb aber sind Vergleiche mit Ergebnissen der HTE angebracht, zumal wenn entsprechende experimentelle Daten nicht existieren. Soweit diese aber vorhanden und genügend viele (≥ 6) Entwicklungsterme nach $1/T$ berechnet wurden, hat sich die HTE als eine der exaktesten Methoden zur Bestimmung kritischer Exponenten erwiesen.

3. Skalentheorie

a. Skalenhypothese und Kadanoff's Renormierungsgruppe

Wir geben hier eine kurze Interpretation der Entwicklung der Skalentheorie aus der Kadanoff'schen Vorstellung^{1,90}, daß bei einer nahe am kritischen Punkt sehr großen Korrelationslänge ξ und der Längentransformation eines Gitters mit dem Gitterabstand a auf ein effektives Gitter mit Abstand $La \ll \xi$ die Hamilton-Funktionen beider Systeme in der funktionalen Abhängigkeit von Spin-Operatoren etc. übereinstimmen sollten. Das gröbere Gitter mit Gitterabstand La erhielt Kadanoff durch Zusammenfassung von L^d Spins des ursprünglichen Gitters zu einem Blockspin im neuen Gitter mit der einschneidenden Annahme, daß der Blockspin wieder nur die Werte ± 1 annehmen kann. Die Wechselwirkungskonstante J wird natürlich mittransformiert, so daß folgender Zusammenhang besteht

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \\ \beta \bar{\mathcal{H}} &= -\bar{J} \sum_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta - \bar{h} \sum_\alpha S_\alpha \end{aligned} \quad (1)$$

S_α sind Blockspins

wobei nach Kadanoff $\bar{h} = L^x h$; führt man außerdem die kritische Temperatur als Maß für die Wechselwirkungsstärke ein, so muß, da $\beta \bar{\mathcal{H}}$ und $\beta \mathcal{H}$ zu einunddemselben Ising-Modell gehören, zwischen den reduzierten Temperaturen $\bar{t}$ und t die lineare Beziehung $\bar{t} = L^y t$ gelten. Da nun die Hamilton-Operatoren in gleicher Weise von den Spins abhängen, gleicht auch das Gibbssche Potential pro Einheitszelle ($V = a^3$) dem Gibbsschen Potential pro "Einheitsblock" ($V = L^3 a^3$) bis auf den Skalenfaktor L^d :

$$g_{a^3}(t, h) = L^{-d} g_{(La)^3}(L^y t, L^x h) \quad (2)$$

Diese Formel ist aber genau die Skalenhypothese, mit der wir auch hätten beginnen können. Sie besagt offenbar, daß die thermodynamischen Potentiale dem Transformationsverhalten in (2) gemäß verallgemeinerte homogene Funktionen sind. Um das Potenzverhalten physikalischer Größen zu erhalten, muß man einmal die entsprechende Ableitung des Gibbsschen Potentials bilden und außerdem den Skalen-

faktor L so wählen, daß die transformierte Skalenvariable in (2) eine Konstante wird. Auf diese Weise (siehe Stanley¹) erhält man folgende Relationen zwischen jeweils drei kritischen Exponenten, so daß stets zwei genügen, um alle anderen zu berechnen:

als Beispiel:

$$M(\tau, h) = \frac{\partial g(\tau, h)}{\partial h} = L^{-d} \frac{\partial g(L^y \tau, L^x h)}{\partial h} = L^{x-d} g(L^y \tau, L^x h)$$

$$\text{Sei } L = h^{-1/x} : \quad M(\tau, h) = h^{\frac{d-x}{x}} g(h^{-y/x} \tau, 1)$$

$$\text{n. Def. } M \propto h^{1/\delta} \text{ für } \tau=0 \Rightarrow \delta = -\frac{x}{x-d}$$

$$\text{Sei } L = \tau^{-1/y} : \quad M(\tau, h) = \tau^{\frac{d-x}{y}} g(1, \tau^{x/y} h)$$

$$\text{n. Def. } M \propto \tau^\beta \text{ für } h=0 \Rightarrow \beta = \frac{d-x}{y}$$

$$\chi(\tau, h) = \frac{\partial^2 g(\tau, h)}{\partial h^2} = L^{2x-d} g(L^y \tau, L^x h)$$

$$\chi(\tau, 0) \propto \tau^{-\gamma} \Rightarrow \gamma = \frac{2x-d}{y}$$

$$C(\tau) = -T \frac{\partial^2 g(\tau, 0)}{\partial \tau^2} = -T L^{2y-d} g(L^y \tau, 0)$$

$$C(\tau) \propto \tau^{-\alpha} \Rightarrow \alpha = \frac{2y-d}{y}$$

kombiniert ergeben diese Exponenten:

$$\gamma = \beta(\delta - 1)$$

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

b. Ableitung der Skalengesetze aus einer Analogie zur relativistischen Quantenfeldtheorie: Polyakov's Theorie

Wir beginnen, Polyakov folgend⁹¹, mit der Transformation eines Quantenspin-Problems auf ein rein feldtheoretisches Modell, um die Allgemeinheit der feldtheoretischen Beschreibung von Phasenübergängen anzuzeigen. Zu einem Ising-Hamiltonian der Form

$$H = - \frac{1}{2} \sum_{r,r'} v_{rr'} \sigma_r \sigma_{r'}, \quad \sigma_r = \pm 1 \quad (1)$$

läßt sich das Vielteilchenproblem durch folgenden Trick in der Zustandssumme auf ein Einteilchenproblem bezüglich der Spins zurückführen

$$\begin{aligned} Z &= \text{tr} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \sigma_r \sigma_{r'}} \\ &= \lim_{\varphi \rightarrow 0} \text{tr} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}}} \prod_r e^{\sigma_r \varphi_r} \end{aligned} \quad (2)$$

Dabei sind die φ_r als Hilfsfelder zu verstehen, die die ursprüngliche Spin-Wechselwirkung darstellen. Die Umformung in Gl.(2) ist exakt und ergibt sich aus der Entwicklung der e-Funktion gemäß

$$\begin{aligned} e^{-\beta H} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \sigma_r \sigma_{r'} \right)^n \lim_{\varphi \rightarrow 0} e^{\sum_r \varphi_r \sigma_r} \\ &= \lim_{\varphi \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}} \right)^n e^{\sum_r \varphi_r \sigma_r} \\ &= \lim_{\varphi \rightarrow 0} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}}} e^{\sum_r \varphi_r \sigma_r} \end{aligned} \quad (3)$$

Das Einteilchenproblem eines Spins im Feld φ ist natürlich exakt lösbar, so daß mittels $\text{tr}_r e^{\varphi_r \sigma_r} = 2 \cosh \varphi_r$ die Zustandssumme alleine durch φ ausgedrückt ist

$$\begin{aligned} Z &= 2^N \lim_{\varphi \rightarrow 0} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}}} \prod_r \cosh \varphi_r \\ &= 2^N \lim_{\varphi \rightarrow 0} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}}} e^{\sum_r \ln \cosh \varphi_r} \end{aligned} \quad (4)$$

Die Tatsache, daß die Spinvariablen mit diskreten Einstellmöglichkeiten durch kontinuierliche klassische Variable gemäß Gleichung (4a) ersetzt werden konnten, soll zur Konstruktion einer vorteilhaften klassischen Diagrammtheorie benutzt werden.

Die geschilderte Transformation läßt sich auch für mehrkomponentige Spins durchführen, wenn man, was in der Nähe des Phasenübergangs gerechtfertigt ist, im klassischen Limes ($\hbar \rightarrow 0$) die Kommutatoren der Spinoperatoren vernachlässigt. Man erhält

$$Z = \text{tr}_{\{\sigma^\alpha\}} e^{\frac{1}{2} \beta \sum_{rr'} v_{rr'}^\alpha \sigma_r^\alpha \sigma_{r'}^\alpha} \rightarrow \lim_{\{\varphi^\alpha \rightarrow 0\}} e^{\frac{1}{2} \beta \sum_{rr'} v_{rr'}^\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi_r^\alpha} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}^\alpha}} \prod_{r''^\alpha} 2 \cosh \varphi_{r''^\alpha} \quad (4b)$$

Im folgenden betrachten wir nur den einkomponentigen Fall.

Die der Spin-Korrelationsfunktion entsprechende Größe in φ finden wir durch Ableitung von $\ln Z$ nach βV (wir könnten auch ein äußeres Magnetfeld einführen ebenso wie die Verallgemeinerung auf mehrkomponentige Felder durchführbar ist).

In der ursprünglichen Form (1) erhalten wir das Standard-Ergebnis

$$g_{(1)}(r_1, r_2) = \frac{\partial}{\partial \beta v_{r_1 r_2}} \ln Z = \frac{1}{Z} \text{tr} \{ e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \sigma_r \sigma_{r'}} \sigma_{r_1} \sigma_{r_2} \} \equiv \langle \sigma_{r_1} \sigma_{r_2} \rangle \quad (5)$$

Benutzt man dagegen die Darstellung gemäß Gl. (4), so folgt

$$\begin{aligned} g_{(1)}(r_1, r_2) &= \frac{\partial}{\partial \beta v_{r_1 r_2}} \ln Z = \lim_{\varphi \rightarrow 0} \frac{1}{Z(\varphi)} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}}} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_{r_1}} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r_2}} + \frac{\partial}{\partial \varphi_{r_2}} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r_1}} \right) e^{\sum_r \ln \cosh \varphi_r} \\ &= \lim_{\varphi \rightarrow 0} \frac{1}{Z(\varphi)} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}}} e^{\sum_r \ln \cosh \varphi_r} \tanh \varphi_{r_1} \tanh \varphi_{r_2} + \delta_{r_1 r_2} (1 - \langle \tanh^2 \varphi_{r_1} \rangle) \\ &\cong \lim_{\varphi \rightarrow 0} \frac{1}{Z(\varphi)} e^{\frac{1}{2} \sum_{rr'} \beta v_{rr'} \frac{\partial}{\partial \varphi_r} \frac{\partial}{\partial \varphi_{r'}}} e^{\sum_r \ln \cosh \varphi_r} \varphi_{r_1} \varphi_{r_2} + \delta_{r_1 r_2} (1 - \langle \varphi_{r_1}^2 \rangle) \quad (6) \\ &\equiv \langle \varphi_{r_1} \varphi_{r_2} \rangle + \delta_{r_1 r_2} (1 - \langle \varphi_{r_1}^2 \rangle) \end{aligned}$$

wobei die neue Definition des Mittelwerts evident ist. Die einzige Approximation in den Zwischenschritten von (6) ist die Annahme, daß nur die niedrigsten Potenzen von φ aus der Entwicklung von $\tanh \varphi$ 'relevant' sind, weil die Mittelung den Grenzprozeß $\varphi \rightarrow 0$ einschließt. Da man nur von dem langreichweitigen Anteil der Korrelationsfunktion typisch kritisches Verhalten am Phasenübergang erwarten kann, ignorieren wir den speziellen Punkt $r_1 = r_2$ und betrachten $\langle \varphi_{r_1} \varphi_{r_2} \rangle$ als Äquivalent in φ zu $\langle \sigma_{r_1} \sigma_{r_2} \rangle$. Entsprechend läßt sich zeigen, daß dem Ordnungsparameter $\langle \sigma_r \rangle$ genau der Mittelwert von φ entspricht, ie $\langle \varphi_r \rangle$. Zur Ableitung einer nichtrenormierten Diagrammtheorie interessieren wir uns für die Korrelationsfunktion

Diese Gleichung vermittelt eine implizite Relation für die exakte kritische Temperatur $T_c = v_0 \sum (0, T_c)$, die es erlaubt, die Greensfunktion durch die kritische Variable $t = T' - T_c'$ auszudrücken, wobei wir die Temperaturskala mit $T' = T/v_0$ umnormiert haben, so daß folgt

$$g(k, T) = \left[t + b k^2 - \left(\sum(k, T) - \sum(0, 0) \right) \right]^{-1}, \text{ wenn } v_k = v_0 - \frac{v_0^2 b}{T} k^2 + O(k^4) \quad (11)$$

Man beachte, daß wegen $\eta > 0$ und $\gamma > 1$, was experimentell abgesichert ist, die stärksten Singularitäten bzgl. k und bzgl. t weiterhin in den unbekannten Selbstenergien $\sum(k, t) - \sum(0, 0)$ verborgen bleiben. Dennoch hat man mit Polyakov's Renormierungsverfahren zweierlei gewonnen:

1. gibt es eine Ward-Identität bezüglich t , die Vertex $\tilde{\Gamma}_3$ und Greenfunktion in Beziehung setzt gemäß

$$\tilde{\Gamma}_3(k, t) = \frac{\partial g^{-1}(k, T)}{\partial t} \equiv \text{diagramm} \quad (12)$$

Wenn also die Korrelationsfunktion im kritischen Bereich einem führenden Potenzverhalten $G(0, t) \propto t^{-\gamma}$ genügt, was mit $\sum(0, t) - \sum(0, 0) \propto t^\gamma$ äquivalent ist, folgt auch für $\tilde{\Gamma}_3$ ein kritisches Potenzverhalten mittels

$$\tilde{\Gamma}_3 \propto t^{\gamma-1} \quad (13)$$

Die physikalische Relevanz dieses Verhaltens besteht in der Beziehung zwischen $\tilde{\Gamma}_3$ und der spezifischen Wärme, die mit Hilfe der Ward-Identität in einer Beziehung zwischen Korrelationsfunktion und spezifischer Wärme aufgeht. Aus der inneren Energie U ergibt sich die spezifische Wärme mittels

$$C = \frac{dU}{dT} \propto \int d^d k v_k \frac{\partial g(k, t)}{\partial t} \propto \int d^d k \tilde{\Gamma}_3^2(k, t) g^2(k, t) \quad (14)$$

Dabei wird $\int d^d k$ als k^d berücksichtigt, denn der Impuls k ist eine kritische Variable und genügt daher einer Skalenbeziehung mit anderen kritischen Variablen, z.B. $k \sim t^\nu$. Diese Beziehung läßt sich aus der Form der Greenfunktion $G(k, t) = G(k \cdot \xi(t))$ ableiten, wonach k proportional zur inversen Korrelationslänge $\xi(t)^{-1} \propto t^\nu$ ist.

Als Konsequenz erhält man das Potenzgesetz der spezifischen Wärme im kritischen Bereich als

$$C \propto \tilde{\Gamma}_3^2 g^2 k^d \propto t^{-2+d\nu} \quad (15)$$

Daraus folgt ein neues Skalengesetz, das aus der Skalenhypothese nicht zu erhalten ist. Im Gegensatz zu den früher diskutierten Skalengesetzen werden in dieser aus (15) folgenden Gleichung

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (16)$$

nur zwei Exponenten in Beziehung gesetzt. Dennoch benötigt man nach wie vor die Kenntnis zweier Exponenten zur Bestimmung aller anderen.

Bisher haben wir von einer Analogie zur relativistischen Quantenfeldtheorie keinen Gebrauch machen müssen. Das ändert sich, wenn wir uns auch für das Potenzverhalten von 4-Punkt-, 6-Punkt- und höheren Korrelationsfunktionen interessieren, die zwar meist keine direkte physikalische Bedeutung aber doch eine prozedurale Relevanz besitzen. Die Dimensionsanalyse benutzt dabei, daß

2. in Polyakov's Theorie eine Unitaritätsrelation für die Vertices Γ_n mit beliebigem n existiert. Das ist zunächst unverständlich, denn bisher waren alle benutzten Größen reell und insbesondere wurde keine unitäre S-Matrix zur Ableitung der Diagrammtheorie benötigt. Polyakov hat aber zeigen können, daß nach einer analytischen Fortsetzung auf imaginäre Impulse die zuvor benutzten φ -Propagatoren die Form der Propagatoren in der relativistischen Quantenfeldtheorie annehmen, nämlich $i/(k^2 - m^2 + i\delta)$. Dabei entspricht das Massenquadrat der Größe t . Die Integrale sind pseudo-euklidisch und die Integrationskontur ist bezüglich k_x um 90° gedreht, weshalb $k^2 = k_x^2 - k_y^2 - k_z^2 < 0$. Die Unitaritätsrelation hat dann nach Polyakov die Form:

$$\text{Im } G^{-1}(k) = \int d^d k_1 \sum_n \Gamma_n(k_1) \text{Im } G(k_1) \dots \text{Im } G(k_{n-1}) \text{Im } G(\sum_i k_i - k)$$

$$\Rightarrow \text{Im } G^{-1}(k) = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \dots \quad (17)$$

Daraus läßt sich auch für die Funktionen in der euklidischen Metrik eine Dimensionsanalyse durchführen, die das kritische Potenzverhalten der n -Punkt-Funktionen auf das von $G \propto t^{-\gamma}$ zurückführen

$$\dim G^{-1} = (\dim \Gamma_n^2) \cdot (\dim G^{n-1}) \cdot (\dim(k^d)^{n-2})$$

$$\Rightarrow \Gamma_n \propto t^{\frac{n}{2}\gamma + (2-n)d\nu} \quad (18)$$

Diese Gleichungen basieren auf der Annahme, daß jedes der zu $\text{Im } G^{-1}$ beitragenden Diagramme von derselben Größenordnung ist, was von Gribov und Migdal^{92,93,95,96} plausibel gemacht wurde.

Wie gesagt kann man auch ein Magnetfeld in dieser Theorie mitberücksichtigen. Ebenso läßt sich der Ordnungsparameter als Einpunkt-Funktion formulieren, womit sämtliche Skalengesetze der konventionellen Skalentheorie abgeleitet werden können.

Wir werden später (der Kürze wegen) in einem besonders interessanten Fall von der Dimensionsanalyse des 3-Punkt-Vertex Γ_3 Gebrauch machen, dessen Anwesenheit zu einem diskontinuierlichen Phasenübergang führt, wenn Γ_3 nicht allein durch die Symmetriebrechung in der geordneten Phase erzeugt wird. Solche Aussagen können mit Hilfe der Skalentheorie nicht gemacht werden und es bedarf einer verfeinerten Theorie, um feststellen zu können, ob es auch bei Phasenübergängen 1. Ordnung noch Skalengesetze, kritische Bereiche und kritisches Potenzverhalten überhaupt noch gibt.

4. Wilson-Theorie

a. Renormierungsgruppe (RG)

Ohne eine detaillierte Ableitung eines der vielen RG-Verfahren^{11,83-85,94,97-99}, die in der Theorie der Phasenübergänge zur transparenten Beschreibung kritischer Fluktuationen genutzt wurden und werden, bleiben für die Zwecke dieser Arbeit zwei wesentliche Dinge: 1. Begriffe und Zusammenhang der RG-Prozedur zu klären und 2. soll anhand der für ein zweikomponentiges Spinmodell mit axialer und kubischer Anisotropie explizit durchgeführten Analyse eine RG-Grundlage gegeben werden, die später auch zur Diskussion genauerer Diagramm-Rechnungen dient.

ad 1.: Wilson hat in seiner ursprünglichen approximativen RG-Darstellung diese als eine Erweiterung der Kadanoff'schen Vorstellung der Konstruktion effektiver Spin-Hamiltonians diskutiert¹¹. Die Erweiterung besteht darin, daß unendlich viele verschiedene Blockspins, deren Größe unbeschränkt ist und durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung gewichtet wird, zur Zerlegung einer Spinfeld-Variablen im Phasenraum benutzt wird. Nach Polyakov's Transformation eines quantenmechanischen Isingmodells auf ein klassisches feldtheoretisches Modell mit Grenzprozeß, welches sich mit einer gewöhnlichen klassischen Diagrammtheorie behandeln läßt, ist Wilson's Verfahren, Quanteneffekte etwa aufgrund verschiedener Quantenzahlen oder der Spinstatistik am Phasenübergang zu vernachlässigen, gerechtfertigt. Auf diese Weise gelangt man zu einer Analogie zwischen magnetischen- und strukturellen Phasenübergängen, die durch klassische Hamiltonian-Funktionen folgender Form beschrieben werden

$$H \equiv \beta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{x}} \left(r_0 \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^2(\mathbf{x}) + \sum_{\alpha=1}^n (\nabla S_{\alpha}(\mathbf{x}))^2 \right) + \frac{u_0}{4!} \int_{\mathbf{x}} \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(\mathbf{x}) \right)^2 \quad (1)$$

wobei Ortsraum- und Spinraum-Isotropie angenommen wurde und die Felder s_{α} einmal klassische Spins und zum anderen lokale Normalkoordinaten mit jeweils n Komponenten darstellen.

Während die Hamilton-Funktionen dieser magnetisch beziehungsweise strukturell ordnenden Systeme in gleicher Weise von den Feldvariablen S_α abhängen, was im wesentlichen der Grund für das äquivalente kritische Verhalten beider Systeme ist, ist die Temperaturabhängigkeit der Parameter r_0 und u_0 in folgender Weise unterschiedlich:

a) magnetischer Fall: hier verweisen wir auf die Arbeit von Wilson¹¹, in der gezeigt wurde, daß $r_0 = \text{const } (T - T_{c0})$ und u_0 bis auf irrelevante T-abhängige Terme konstant ist; dabei wurde eine temperaturabhängige Normierung der Spins mittels $\hat{S}_\alpha \rightarrow S_\alpha / \sqrt{T}$ gewählt, die den Vorfaktor des $\sum_\alpha (\nabla S_\alpha)^2$ -Terms, der die räumliche Wechselwirkung beschreibt, auf 1/2 fixiert.

b) Modell für strukturelle Umwandlungen: da $\mathcal{H}$ temperaturunabhängig sein muß, sind zunächst alle Parameter in $H = \beta \mathcal{H}$ proportional zu $1/T$. Wir haben dann in Modell (1) die Variablen mit $T_c \neq 0$ mittels $Q_\alpha \rightarrow S_\alpha / \sqrt{T_c}$ normiert, den Vorfaktor des "Gradienten-Terms" nach $T - T_c$ entwickelt und anschließend für den Phasenübergang irrelevante Terme der Ordnung $(T - T_c) \int_q q^2 \sum_\alpha S_\alpha(q) S_\alpha(-q)$ vernachlässigt. Die Irrelevanz dieser Terme beruht darauf, daß ähnlich wie $q^4 \sim t^{4\nu}$ auch $tq^2 \sim t^{1+2\nu}$ gegenüber $q^2 \sim t^{2\nu}$ vernachlässigbar ist. In diesem Fall b) darf man also r_0 und u_0 als zu $1/T$ proportional betrachten. Es wird sich später herausstellen, daß, solange $r_0 - r_{0c} \propto T - T_c$, für das kritische Verhalten bei endlichen T_c 's die spezielle Form der T-Abhängigkeit von r_0 keine Rolle spielt, während sie in u_0 überhaupt vernachlässigbar ist.

Das Renormierungsgruppen-Verfahren ist jedoch nicht auf Hamiltonians vom Typ (1) beschränkt, so daß die Formulierung für beliebige H vorzuziehen ist, allerdings mit Referenz auf (1) zur Illustration. Im Sinne von Wilson werden bei jedem RG-Schritt in der Zustandssumme nichtkritische Fluktuationen ausintegriert, wonach das Ergebnis als Exponentialfunktion geschrieben und dem nichtintegrierten Teil des Hamiltonians zugeschlagen wird, um die Zustandssumme wieder in die ursprüngliche Form jedoch mit einem neuen Hamiltonian $\bar{H}$ schreiben zu können, ie $Z = \int \delta \bar{s} e^{-\bar{H}}$. Wird unser System am Punkt $q=0$ kritisch, so sind dabei die Fourier-

komponenten s_q der Felder mit $b^{-1} \leq q \leq q_{\max} = 1$ ausintegriert, während diejenigen mit $0 \leq q < b^{-1}$ weiterhin die Variablen der nicht ausgeführten (und nicht ausführbaren) Funktionalintegration in Z bleiben. Um Z auch bezüglich des Integrationsbereiches wieder in der alten Form schreiben zu können, führt man eine Längskontraktion mit dem Skalenfaktor $b > 1$ (Wilson's approximative RG: $b=2$) durch, die die ursprüngliche Größe der Brillouin-Zone wiederherstellt. Auf der transformierten Längenskala variieren die Felder $s(\bar{x}) = s(x/b)$ natürlich anders als auf der Ausgangsskala. Um diese Spinfluktuationen unter der RG-Transformation R invariant zu lassen, führt man noch eine Wellenfunktionsrenormierung $\bar{s}(\bar{x}) = \xi s(x/b)$ durch. Diese erhält z.B. für den Hamiltonian (1) den Vorfaktor 1 des Gradienten-Terms $(\nabla s(x))^2$, wobei $\xi = b^{(2-d-\eta)/2}$ ist. Wir verweisen darauf, daß das RG-Transformationsverhalten entsprechender Größen auch auf die Skalengesetze führt.

Wir können nun davon ausgehen, daß man die RG-Transformation beliebig oft etwa auf den Hamiltonian anwenden darf, da in jeder Stufe der effektive Hamiltonian wieder von der Form des Ausgangshamiltonians ist. Da man durch k -maliges Anwenden von R mit $k \rightarrow \infty$ in Wirklichkeit die gesamte Brillouin-Zone einschließlich kritischer Impulse um $q=0$ ausintegriert hat, muß das kritische Verhalten durch einen Fixpunkt-Hamiltonian $H^* = \lim_{k \rightarrow \infty} \bar{H}_k$ mit der Eigenschaft $R(H^*) = H^*$ beschrieben werden, sofern dieser existiert. Die Bedeutung von H^* für das kritische Verhalten ergibt sich daraus, daß die zugehörige Ordnungsparameter-Korrelationsfunktion divergent ist. In der Praxis findet man einen Fixpunkt-Hamiltonian aus den Rekursionsformeln für die Koeffizienten der Felder in βH , was wir im nächsten Abschnitt mit dem approximativen RG-Verfahren von Wilson konkret durchführen werden. Gibt es mehrere Fixpunkte, so bestimmt derjenige das kritische Verhalten, der für den gegebenen Parametersatz des Anfangshamiltonians aus der RG-Prozedur hervorgeht. Deshalb bezeichnet man diesen Fixpunkt als attraktiv beziehungsweise stabil. Es stellt sich heraus, daß, obwohl die Fixpunktwerte der Koeffizienten nicht universell sind, die wesentliche Eigenschaft der Fixpunkte nur ihre Symmetrie im Feldraum ist. Nach dieser Symmetrie läßt sich das kritische Verhalten klassifizieren; mit anderen Worten sind die kritischen Exponenten in Übereinstimmung mit der Universalitätshypothese alleine durch die Symmetrie des attraktiven Fixpunkts

bestimmt. Attraktiv oder auch stabil ist ein Fixpunkt dann, wenn er den Einfluß aller relevanten Symmetrien resp. Operatoren berücksichtigt, die nicht vom Ausgangshamiltonian ausgeschlossen sind. Ein relevanter Operator O_i führt nämlich von einem nicht stabilen Fixpunkt weg und hin zu dem stabilen Fixpunkt, sofern existent. Bei diesem crossover-Prozeß gelangt man von dem Koeffizient μ_i von O_i mit dem Wert $\mu_i = 0$ zu einem $\mu_i^* \neq 0$ mit neuen kritischen Exponenten. Die Art und Stärke des crossover hängt vom crossover-Exponenten ab. Dies ist von großer Bedeutung für die Physik, da es relevante Störungen wie z.B. äußeren Druck gibt, die experimentell frei wählbar sind.

Ohne hier schon konkret Exponenten ausrechnen zu wollen, ist festzustellen, daß diese sich aus der Art und Weise wie der Fixpunkt erreicht wird ableiten lassen. Der kritische Bereich ist natürlich nahe am Fixpunkt und dort kann man den effektiven Hamiltonian bzw. die Rekursionsformeln für die Koeffizienten um den Fixpunkt linearisieren. Man kann dann schreiben

$$R(\bar{H}) = H^* + \sum_i \mu_i \Lambda_i O_i + O(\mu^2)$$

$$R_L O_i = \Lambda_i O_i \quad (2)$$

wobei die O_i ein vollständiger Satz von Eigenoperatoren des linearen Renormierungsgruppen-Operators R_L mit den Eigenwerten Λ_i sind. Die diagonalisierten Rekursionsformeln ergeben für die zu O_i konjugierten Skalenfelder μ_i :

$$\bar{\mu}_i = \Lambda_i \mu_i \quad \text{mit} \quad \Lambda_i = b^{\lambda_i} \quad (3)$$

Man sieht, daß ein Operator O_i dann irrelevant ist, wenn $\lambda_i < 0$, weil dann $\mu_i^* = 0$ und H^* von den Störungen O_i unbeeinflusst bleibt. Dagegen ist O_i relevant und führt von H^* weg, wenn $\lambda_i > 0$. Der Satz der kritischen Exponenten bzgl. eines Fixpunktes hängt mit dem entsprechenden Satz der λ_i zusammen.

ad 2: Die Rolle, die die axiale - und kubische Anisotropie für das kritische Verhalten spielt, wollen wir nun mit Hilfe des approximativen RG-Verfahrens von Wilson¹¹ an einem anisotropen XY-Modell studieren. Die Approximation in dem genannten RG-Verfahren besteht darin, daß durch Vernachlässigung von Wechselwirkungen des Typs

$(\nabla S(x))^2 s^2(x)$ in den effektiven Hamilton-Funktionen des kritischen Exponent $\eta=0$ gesetzt ist, was einen Fehler von der Ordnung ϵ^2 bedeutet. Wir werden daher versuchen, bis zu $O(\epsilon)$ exakt den folgenden Modell-Hamiltonian zu behandeln:

$$H \equiv \beta \mathcal{H} = \int_x (P(S_1(x), S_2(x)) + (\nabla S_1(x))^2 + (\nabla S_2(x))^2) \quad (1)$$

$$\text{wobei: } P(S) \equiv r_1 S_1^2 + r_2 S_2^2 + u_1 S_1^4 + u_2 S_2^4 + v S_1^2 S_2^2$$

Die axiale Anisotropie ist offensichtlich sowohl in den harmonischen Termen wie in denen von $O(S^4)$ berücksichtigt. Die kubische Anisotropie kann dagegen erst in $O(S^4)$ auftreten. Die Indizes der Koeffizienten und der Operatoren beziehen sich auf die Feldkomponenten; die hier der Kürze wegen verwendeten Größen r_1, r_2, u_1 und u_2 haben in der Diagrammtheorie (s. II.4, III) ihre Entsprechung in $r_{0||}, r_{0\perp}$ ($u_{0||}$ und $u_{0\perp}$). Wir führen jetzt einen der zu iterierenden RG-Schritte durch und benutzen dazu Wilson's Formel:

$$\bar{P}(\bar{S}) = -2^d \left[\ln I(\xi \bar{S}_1, \xi \bar{S}_2) - \ln I(0,0) \right] \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } I(\xi \bar{S}_1, \xi \bar{S}_2) &\equiv \int ds_1 ds_2 e^{-\xi^2 - \frac{1}{2} P(s - \xi S) - \frac{1}{2} P(s + \xi S)} \\ &= e^{-r_1 \xi^2 \bar{S}_1^2 - r_2 \xi^2 \bar{S}_2^2 - u_1 \xi^4 \bar{S}_1^4 - u_2 \xi^4 \bar{S}_2^4 - v \xi^4 \bar{S}_1^2 \bar{S}_2^2} \times \\ &\quad \times \int ds_1 ds_2 \exp \left\{ -(1+r_1) S_1^2 - (1+r_2) S_2^2 - u_1 S_1^4 - u_2 S_2^4 - v S_1^2 S_2^2 - \right. \\ &\quad \left. - 6u_1 \xi^2 S_1^2 \bar{S}_1^2 - 6u_2 \xi^2 S_2^2 \bar{S}_2^2 - v \xi^2 (S_1^2 \bar{S}_2^2 + S_2^2 \bar{S}_1^2) - 4v \xi^2 S_1 S_2 \bar{S}_1 \bar{S}_2 \right\} \end{aligned}$$

wobei $\xi = 2^{1-d/2}$ den Vorfaktor 1 bei den Gradienten-Termen erhält. Die transformierten Felder werden mit $\bar{S}$ bezeichnet und $\bar{P}(\bar{S})$ ergibt den effektiven Hamiltonian $k+1$ -ter Stufe, wenn man von dem k -ter Stufe ausgegangen war.

Die Auswertung der Integrale in Gl. (2) läßt sich bewerkstelligen, wenn man, wie Wilson und Fisher in Ref. 94, nach kleinen u 's und v entwickelt, was für kleine $\epsilon = 4-d$ gerechtfertigt erscheint. So ergibt sich aus (2):

$$\begin{aligned} \bar{P}(\bar{S}) &= 4 r_1 \bar{S}_1^2 + 4 r_2 \bar{S}_2^2 + 2^\epsilon (u_1 \bar{S}_1^4 + u_2 \bar{S}_2^4 + v \bar{S}_1^2 \bar{S}_2^2) \\ &\quad + 24 (u_1 \langle S_1^2 \rangle \bar{S}_1^2 + u_2 \langle S_2^2 \rangle \bar{S}_2^2) + 4 v (\langle S_2^2 \rangle \bar{S}_1^2 + \langle S_1^2 \rangle \bar{S}_2^2) \\ &\quad - 2^\epsilon \left[18 (u_1^2 (\langle S_1^4 \rangle - \langle S_1^2 \rangle^2) \bar{S}_1^4 + u_2^2 (\langle S_2^4 \rangle - \langle S_2^2 \rangle^2) \bar{S}_2^4 + \right. \\ &\quad \left. + 2 u_1 u_2 (\langle S_1^2 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 \rangle \langle S_2^2 \rangle) \bar{S}_1^2 \bar{S}_2^2 \right) \quad (3) \\ &\quad + \frac{v^2}{2} ((\langle S_2^4 \rangle - \langle S_2^2 \rangle^2) \bar{S}_1^4 + (\langle S_1^4 \rangle - \langle S_1^2 \rangle^2) \bar{S}_2^4 + 2 (9 \langle S_1^2 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 \rangle \langle S_2^2 \rangle) \bar{S}_1^2 \bar{S}_2^2) \\ &\quad + 6 u_1 v ((\langle S_1^2 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 \rangle \langle S_2^2 \rangle) \bar{S}_1^4 + (\langle S_1^4 \rangle - \langle S_1^2 \rangle^2) \bar{S}_1^2 \bar{S}_2^2) + \\ &\quad \left. + 6 u_2 v ((\langle S_1^2 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 \rangle \langle S_2^2 \rangle) \bar{S}_2^4 + (\langle S_2^4 \rangle - \langle S_2^2 \rangle^2) \bar{S}_1^2 \bar{S}_2^2) \right] \end{aligned}$$

Nach der RG-Theorie erwarten wir, daß $\bar{P}(\bar{s})$ bezüglich der transformierten Spinvariablen $\bar{s}$ die gleiche funktionale Abhängigkeit zeigt wie $P(s)$, d.h. wir erwarten: $\bar{P}(\bar{s}) = \bar{r}_1 \bar{s}_1^2 + \bar{r}_2 \bar{s}_2^2 + \bar{u}_1 \bar{s}_1^4 + \bar{u}_2 \bar{s}_2^4 + v \bar{s}_1^2 \bar{s}_2^2$. Damit erhalten wir eine rekursive Verknüpfung zwischen den neuen und den alten Koeffizienten der Spins. Mit den folgenden (exakten) Resultaten für die Mittelwerte

$$\begin{aligned} \langle S_{1,2}^2 \rangle_0 &= \frac{1}{2} \frac{1}{1+r_{1,2}} - \frac{3}{2} \frac{u_{1,2}}{(1+r_{1,2})^3} - \frac{v}{4} \frac{1}{(1+r_{1,2})^2} \frac{1}{1+r_{2,1}} \\ \langle S_{1,2}^4 \rangle_0 &= \frac{3}{4} \frac{1}{(1+r_{1,2})^2} \\ \langle S_\alpha^2 S_{\alpha'}^2 \rangle_0 &= \langle S_\alpha^2 \rangle_0 \langle S_{\alpha'}^2 \rangle_0 \quad \text{für } \alpha \neq \alpha' \end{aligned} \quad (4)$$

erhalten wir durch Koeffizientenvergleich zwischen Gl.(3) und $\bar{P}(\bar{s})$

$$\begin{aligned} \bar{r}_{1,2} &= 4 \left(r_{1,2} + \frac{3u_{1,2}}{1+r_{1,2}} - \frac{9u_{1,2}^2}{(1+r_{1,2})^3} - \frac{3}{2} u_{1,2} v \frac{1}{(1+r_{1,2})^2} \frac{1}{1+r_{2,1}} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{3}{2} u_{2,1} v \frac{1}{(1+r_{2,1})^3} + \frac{v}{2} \frac{1}{1+r_{2,1}} - \frac{v^2}{4} \frac{1}{(1+r_{2,1})^2} \frac{1}{1+r_{1,2}} \right) \\ \bar{u}_{1,2} &= 2^6 \left(u_{1,2} - 9u_{1,2}^2/(1+r_{1,2})^2 - \frac{v^2}{4}/(1+r_{1,2})^2 \right) \\ \bar{v} &= 2^6 \left(v - \frac{3u_1 v}{(1+r_1)^2} - \frac{3u_2 v}{(1+r_2)^2} - 2v^2 \frac{1}{1+r_1} \frac{1}{1+r_2} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

Wir bemerken an dieser Stelle, daß diese Rekursionsformeln auch aus denen von Fisher und Pfeuty⁹⁵ (siehe auch Ref. 96) hervorgehen, wenn man dort $b=2$, $n=2$ setzt.

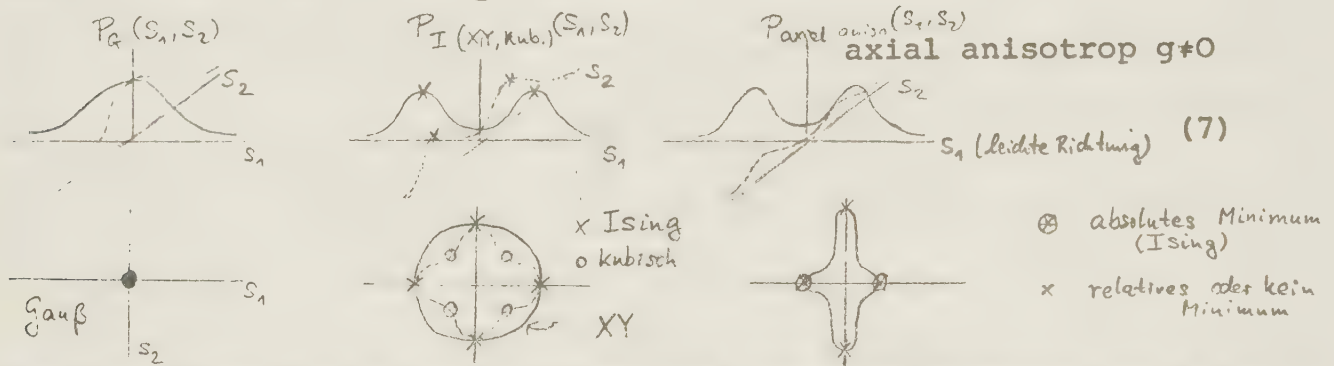
Die Fixpunkte unseres Modells mit $r_1=r_2=r$ und $u_1=u_2=u$ d.h. ohne axiale Anisotropie lauten in $O(\epsilon)$

$$\begin{aligned} r^* &= u^* = v^* = 0 \quad (\text{Gauß-Fixpunkt}) \\ r^* &= -\frac{4}{9} \in \ln 2, \quad u^* = \frac{1}{9} \in \ln 2, \quad v^* = 0 \quad (\text{Ising-Fixpunkt}) \\ r^* &= -\frac{8}{15} \in \ln 2, \quad u^* = \frac{1}{10} \in \ln 2, \quad v^* = 2u^* \quad (\text{XY-Fixpunkt}) \\ r^* &= -\frac{4}{9} \in \ln 2, \quad u^* = \frac{1}{18} \in \ln 2, \quad v^* = 6u^* \quad (\text{kubischer Fixpunkt}) \end{aligned} \quad (6)$$

Bei Anwesenheit von axialer Anisotropie im Ausgangs-Hamiltonian, etwa durch $r_1 < r_2 = r_1 + g$, ergibt sich kein zusätzlicher Fixpunkt mit typisch axialer Asymmetrie, denn, wie man durch Iteration der Rekursionsformeln sieht, divergieren die Koeffizienten r_2 und u_2 nach k -facher Ausführung der RG-Operation für $k \rightarrow \infty$ und eliminieren so den Einfluß der Fluktuationen entlang der energetisch ungünstigen

Richtungen. Für $n=2$ bleiben also nur Fixpunkte vom Gauß- oder Ising-Typ, denn die Anzahl der zum kritischen Verhalten beitragenden Komponenten hat sich auf 1 reduziert.

Die Namen der Fixpunkte beschreiben die Symmetrie des Fixpunkt-Hamiltonians und damit des kritischen Verhaltens und sind den Bezeichnungen der Ausgangsmodelle entliehen. Man kann keine Fixpunkt-Symmetrie erhalten, die im Ausgangshamiltonian ausgeschlossen war. Jede der Fixpunkt-Symmetrien, von denen die stabile noch bestimmt werden muß, wird durch die Lage der Energie-Minima der Fixpunkt-Hamiltonfunktionen H^* dargestellt



Die Stabilität der einzelnen Fixpunkte bzw. die Relevanz der Störungen mit verschiedener Symmetrie kann man aus den Eigenwerten $\lambda_{(Störung)}^{(Fixpunkt)}$ die bspw. durch $\bar{u}=2\lambda_u^I$, $\bar{v}=2\lambda_v^I$ etc. definiert sind und sich aus der Linearisierung der Rekursionsformeln um den entsprechenden Fixpunkt ergeben, ablesen: ist λ negativ, so geht der Abstand zum Fixpunkt gegen null, wenn man die Anzahl der RG-Transformationen gegen unendlich gehen läßt, während er bei $\lambda>0$ divergiert, so daß die entsprechende Störung vom Fixpunkt wegführt, dh sie ist relevant (siehe oben).

Für $g = 0$ erhalten wir durch Linearisierung um die Fixpunkte von Gl. (6):

$$\begin{aligned}
 \lambda_u^G &= \lambda_{v-2u}^G = \epsilon \\
 \lambda_u^I &= \frac{\epsilon}{3} \quad \lambda_{v-2u}^I = -\epsilon \\
 \lambda_u^{XY} &= -\epsilon \quad \lambda_{v-2u}^{XY} = -\epsilon/5 \\
 \lambda_1^{kub} &= \frac{\epsilon}{3} (= \lambda_u^I); \lambda_2^{kub} = -\epsilon (= \lambda_{v-2u}^I)
 \end{aligned}
 \tag{8}$$

Man erkennt, daß nur der XY-Fixpunkt attraktiv ist, weil nämlich λ_u^{XY} und λ_{v-2u}^{XY} negativ sind. Allerdings ist der Stabilitäts-

bereich dadurch eingeschränkt, daß unphysikalische Werte wie u negativ oder $0 < v < 6u$ ausgeschlossen werden müssen.

Wegner² hat für beliebiges n diskutiert, daß der Stabilitätsbereich des Hamiltonians mit $u > 0$ und $nu > (n-1)v$ gegeben ist, was für jede Spin-Konfiguration eine positive Energie ergibt. Er ist größer als der attraktive Bereich des isotropen Fixpunkts (hier XY-Fixpunkt).

Bei endlicher axialer Anisotropie haben wir bereits festgestellt, daß deren Relevanz nur Gauß- oder Ising-Fixpunkt möglich läßt. Da $\lambda_u^{G\ddot{a}u\ddot{u}\ddot{f}} = +\epsilon$ und $\lambda_u^{Ising} = -\epsilon$ gilt, ist in diesem Fall der Ising-Fixpunkt attraktiv.

Läßt man zwangsweise die axiale Anisotropie mit $g \rightarrow 0$ verschwinden, so kommt man wieder zum isotropen XY-Fixpunkt zurück. In dessen Nähe kann man linearisieren, um das crossover-Verhalten zu studieren. Wir werden dies später im Detail mit Diagrammentwicklungen tun.

b. Diagrammentwicklung in $\epsilon=4-d$

Vor der RG-Ära waren die gebräuchlichen Feynman-Graphen-Entwicklungen im kritischen Bereich nicht gerade erfolgreich. Unzweifelhaft Methoden wie die Tieftemperatur-Entwicklung¹⁰² und die $1/d$ -Entwicklung liefern bei den meisten Phasenübergängen kein besseres Verständnis, da das kritische Verhalten bei $T=0$ und $d=\infty$ für dasjenige bei endlichen T_c und d untypisch ist. Die $1/d$ -Entwicklung ist insbesondere durch das bei $d=4$ nichtanalytische Verhalten der kritischen Exponenten behindert. Dagegen ist sie aber, durch Ergebnisse und Verfahren der Wilson-Theorie motiviert, von Fisher mit Erfolg zur Berechnung der kritischen Temperatur verwendet worden¹⁰³. Das kritische Verhalten wird in Übereinstimmung mit der Universalität weniger durch die Größe von T_c als vielmehr durch singuläre Funktionen mit kritischen Exponenten beschrieben. Durch die RG-Analyse¹¹, die die vermutete Exaktheit der MFA-Exponenten für $d > 4$ bestärkt hat, läßt sich eine Diagrammentwicklung mit dem kleinen Parameter ϵ motivieren, die fast auf die gesamte RG-Prozedur verzichtet. Insbesondere wird der kritische Punkt in einem einzigen Schritt erreicht. Dies läßt sich erreichen, indem man den Wilson-Hamiltonian um einen exakt behandelbaren Term, ie quadratisch in

den Feldern, ergänzt, dessen Proportionalitätsfaktor den Fixpunkt festlegt. Dazu eignet sich die inverse Suszeptibilität r , die bei T_c verschwindet. Effektiv mißt r dann die Temperatur von T_c aus.

In Kap. III werden wir die folgende von Wilson stammende Diagrammentwicklung auf anisotrope Systeme anwenden und erweitern. Für das isotrope Wilson-Modell mit n -komponentigen Ordnungsparameter lautet der Hamiltonian $BH = BH_0 + BH_1$

$$\begin{aligned} \beta H_0 &= \frac{1}{2} \int_x \left[r \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^2(x) + \sum_{\alpha=1}^n (\nabla S_{\alpha}(x))^2 \right] \\ \beta H_1 &= \frac{u_0}{4!} \int_x \left(\sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^2(x) \right)^2 + \frac{1}{2} (r_0 - r) \int_x \sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \end{aligned} \quad (1)$$

wobei BH_0 als exakt zu behandelndes Gauß-Modell betrachtet wird, so daß der freie Propagator folgende Form hat

$$G_0(r, q^2) = (q^2 + r)^{-1} \quad (2)$$

und da r^{-1} die exakte ($q=0$)-Suszeptibilität ist, ist $G_0(r, 0) = G(r, 0)$ bei $q=0$ exakt. Der Unterschied zwischen dieser Renormierung und der von Polyakov liegt offenbar im Ersetzen von t durch r , welches für $u_0=0$ gleich r_0 wird und ebenso mit Polyakov's t übereinstimmt. Es ist nun klar, daß wir die Annahme $u_0=O(\epsilon)$ und $r_0-r=O(\epsilon)$ machen dürfen, denn dies vermittelt uns den Übergang von MF-Verhalten (Gauß-Verhalten) bei $\epsilon \leq 0$ zum abweichenden kritischen Verhalten für positives ϵ . Auch wird mit dieser Annahme die Existenz einer störungstheoretischen Entwicklung bzgl. BH_1 begründet. Wir wollen nun in $O(\epsilon)$ die Diagrammentwicklung der Selbstenergiebedingung hinschreiben, die wir für $q=0$ aus den Eigenschaften

$$G(r, 0) = G_0(r, 0) = 1/(q^2 + r) \quad (3a)$$

$$\begin{aligned} G(r, q) &= 1/(q^2 + r_0 - \Sigma_0(r_0, q)) \quad (\text{Dyson-Gleichung}) \\ &= 1/(q^2 + r - (\Sigma(r, q) - \Sigma(r, 0))) \end{aligned} \quad (3b)$$

ableiten und die die Form hat

$$r_0(r) = r + \Sigma(r, 0) \quad (4)$$

$r_0(r)$ stellt die Temperatur in Abhängigkeit von der Suszeptibilität dar, was für technische Belange zweckmäßig ist und zur Diskussion der Physik einfach invertiert wird. Wir setzen jetzt die Kenntnis

der Grundlagen der (klassischen) Diagrammtheorie, modifiziertes Wick-Theorem, linked-cluster-Theorem sowie Technik der Funktionalintegration, voraus und erhalten als Entwicklung von (4) in $O(\epsilon)$:

$$\begin{aligned} 0 &= * + \underbrace{0}_{u_0} \\ &= r_0 - r + (n+2) u_0(\epsilon) K_4 / 12 \int_0^\Lambda dp^2 p^2 / (p^2 + r) + O(\epsilon^2) \\ &= r_0 - r + \frac{(n+2) u_0(\epsilon)}{96 \pi^2} r (\ln r - \ln(r + \Lambda)) - \frac{n+2}{96 \pi^2} u_0(\epsilon) \Lambda + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\rightarrow t \equiv r_0 - r_\infty = r - \frac{n+2}{96 \pi^2} u_0(\epsilon) r \ln r \quad \text{mit } r_\infty = r_0(r=0).$$

wobei $\int d^d p = \frac{K_d}{2} \int_0^\Lambda dp^2 p^{2-\epsilon} = \frac{K_d}{2} \int_0^\Lambda dp^2 (p^2 - \epsilon \ln p + O(\epsilon^2))$; $K_d = 2^{1-d} \pi^{-d/2} \Gamma(d/2)$.

Man kann nun in (5) den logarithmischen Term potenzieren und mit dem erwarteten Potenzgesetz identifizieren. Dann ergibt sich aus

$$\chi \propto t^{-\gamma} \rightarrow t \propto r^{1/\gamma}$$

$$t = r - \frac{n+2}{96 \pi^2} u_0(\epsilon) r \ln r = r^{1 - \frac{n+2}{96 \pi^2} u_0(\epsilon) + O(\epsilon^2)} \quad (6)$$

der kritische Exponent γ als

$$\gamma = 1 + \frac{n+2}{96 \pi^2} u_0(\epsilon) + O(\epsilon^2) \quad (7)$$

Würde darin $u_0(\epsilon)$ von materialspezifischen mikroskopischen Eigenschaften verschiedener Stoffe abhängen, so stünde das Ergebnis (7) im Widerspruch zur Universalität der Exponenten. Wir müssen also $u_0(\epsilon)$ spezifizieren. Damit stellt sich die Frage nach der geeigneten Renormierung von u_0 . Diese ergibt sich aus der skalentheoretischen Forderung $\Gamma_4 \propto u_0 r^{(4-d-2\gamma)/(2-\gamma)}$ (s. Polyakov-Theorie) an den Vierpunkt-Vertex. Die konsistente Diagrammtheorie erfordert nun die Erfüllung der Ward-Identität, die die Renormierung des Vertex festlegt, sobald die Selbstenergie gegeben ist. Unserer Selbstenergie zur Propagator-Renormierung in $O(\epsilon)$ ist genau die Renormierung des 4-Punkt-Vertex zugeordnet, die im RG-Verfahren durch den u^2 -Term in der Rekursionsformel für u gegeben ist, nämlich

$$\begin{aligned} \text{Diagram} &\rightarrow \text{Diagram}, \text{ d.h. } \Gamma_4 = \text{Diagram} = \text{Diagram} + \text{Diagram} + O(u_0^3) \\ \Rightarrow \Gamma_4 &= u_0(\epsilon) - \frac{n+8}{6} u_0^2(\epsilon) \frac{K_4}{2} \int_0^\Lambda dp^2 p^2 \frac{1}{(p^2 + r)^2} \end{aligned} \quad (8)$$

Das Resultat bis $O(\epsilon^2)$ und die anschließende Potenzierung des Logarithmus ergibt sich wie zuvor

$$\Gamma_4 = u_0(\epsilon) \left(1 + \frac{n+8}{96\pi^2} u_0(\epsilon) \ln r \right) = u_0(\epsilon) r^{\frac{n+8}{96\pi^2} u_0(\epsilon)} \quad (9)$$

Polyakov: $\Gamma_4 \propto r^{(\epsilon-2\eta)/(2-\eta)} = r^{\epsilon/2 + O(\epsilon^2)}$, weil $\eta = O(\epsilon^2)$

Wir müssen noch begründen, warum $\eta = O(\epsilon^2)$: η kann aus der Entwicklung von $G(r=0, q) \propto q^{\eta-2}$ bestimmt werden; da aber erst in $O(u_0^2)$ eine impulsabhängige Selbstenergie auftritt, muß $\eta = O(\epsilon^2)$ sein. Dann folgt aber aus (9), daß

$$u_0(\epsilon) = \frac{48 \pi^2 \epsilon}{n+8} + O(\epsilon^2) \quad (10)$$

Dieser universelle Wert macht auch die ϵ -Entwicklung der kritischen Exponenten universell. Wir schreiben im folgenden einfach u_0 für $u_0(\epsilon)$, denken aber daran, daß u_0 stets auf diesen kritischen Wert fixiert ist und daß temperaturabhängige Abweichungen von diesem Wert irrelevant sind und für $T \rightarrow T_c$ ganz verschwinden. Die Irrelevanz der Temperatur-Abhängigkeiten von Vielpunkt-Funktionen (4-, 6-, etc.) kann als Ursache dafür angesehen werden, daß das frühzeitige Abbrechen der Greensfunktions-Hierarchie in der Nähe des Phasenübergangs exakt ist.

Mit (10) und (7) erhalten wir die ϵ -Entwicklung von γ in Übereinstimmung mit der RG in $O(\epsilon)$

$$\gamma = 1 + \frac{n+2}{2(n+8)} \epsilon + O(\epsilon^2), \quad \gamma = 2\nu + O(\epsilon^2) \quad (11)$$

Der nachfolgenden Tabelle der ϵ -Entwicklungen einiger kritischer Exponenten, die auf Rechnungen von Wilson¹², Fisher, Wegner, Aharony, Brezin et al., Nickel¹⁰⁴⁻¹⁰⁷ und andere zurückgeht, entnehmen wir die Werte $\gamma=1.17, 1.245$ und 1.195 in $O(\epsilon)$, $O(\epsilon^2)$ und $O(\epsilon^3)$ für $d=3$ und $n=1$. Damit kommt die Hoffnung zum Ausdruck, daß man die ϵ -Entwicklung bis $\epsilon=1$ als Näherung gebrauchen darf. Insbesondere ergibt sich in $O(\epsilon^2)$ eine gute Übereinstimmung mit HTE-Ergebnissen, bspw. bei $\gamma=1.245$ gegenüber 1.250 (siehe Fisher⁹). Es gibt allerdings auch Hinweise auf einen möglicherweise asymptotischen Charakter der ϵ -Entwicklung (s. auch Kap III.2). Dennoch bleibt die ϵ -Entwicklung eine wichtige Näherung, alleine schon deshalb, weil sie die MFA verbessert und offenbar die wichtigsten kritischen Fluktuationen erfaßt.

Weitere wichtige Anwendungsgebiete der ϵ -Entwicklung sind die Berechnung von Zustandsgleichungen unterhalb T_c ^{108,109}, Berechnungen

Tabelle der ϵ -Entwicklungen kritischer Exponenten nach Wilson, Kogut ⁷⁷

Table 8.1

Formulae obtained to date for critical exponents from Feynman graph calculations. See section 2 for definitions of exponents ($M = H^{1/\delta}$ at $T = T_c$ defines δ). The number n is the number of components of the spin s ; elsewhere in these lectures $n = 1$. The constant T has been calculated to be 0.60103, approximately: see [127]. The formulae for η and γ are obtained in [127]. The other exponents are derived from scaling laws; the scaling laws are derived for the ϵ expansion in [131]:

$$\alpha = -\frac{(n-4)}{2(n+8)}\epsilon - \frac{(n+2)^2}{4(n+8)^2}(n+28)\epsilon^2 - \frac{(n+2)}{8(n+8)^3}\{n^4 + 50n^3 + 920n^2 + 3472n + 4800 - 192(5n+22)(n+8)T\}\epsilon^3$$

$$\beta = \frac{1}{2} - \frac{3}{2(n+8)}\epsilon + \frac{(n+2)(2n+1)}{2(n+8)^2}\epsilon^2 + \frac{(n+2)}{8(n+8)^3}\{3n^3 + 128n^2 + 488n + 848 - 48(5n+22)(n+8)T\}\epsilon^3$$

$$\gamma = 1 + \frac{(n+2)}{2(n+8)}\epsilon + \frac{(n+2)}{4(n+8)^2}(n^2 + 22n + 52)\epsilon^2 + \frac{(n+2)}{8(n+8)^3}\{n^4 + 44n^3 + 664n^2 + 2496n + 3104 - 96(5n+22)(n+8)T\}\epsilon^3$$

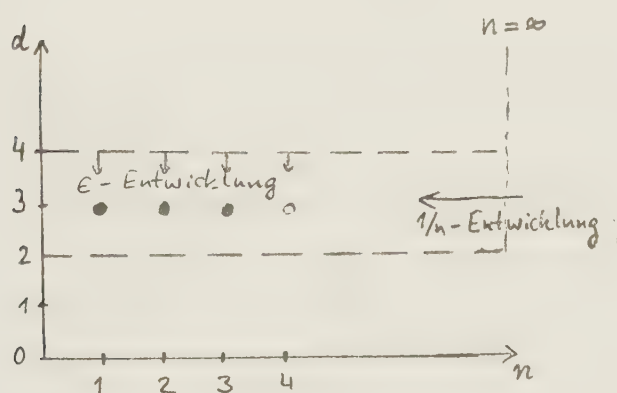
$$\delta = 3 + \epsilon + \frac{1}{2(n+8)^2}\{n^2 + 14n + 60\}\epsilon^2 + \frac{1}{4(n+8)^3}\{n^4 + 30n^3 + 276n^2 + 1376n + 3168\}\epsilon^3 + \frac{1}{16(n+8)^4}\{2n^5 + 96n^4 + 1778n^4 + 12760n^3 + 50280n^2 + 147136n + 263040 + 768(n+2)(n+8)(5n+22)T\}\epsilon^4$$

$$\eta = \frac{(n+2)}{2(n+8)^2}\epsilon^2 + \frac{(n+2)}{8(n+8)^3}(-n^2 + 56n + 272)\epsilon^3 + \frac{(n+2)}{32(n+8)^4}\{-5n^4 - 230n^3 + 1124n^2 + 17920n + 46144 - 768(5n+22)(n+8)T\}\epsilon^4$$

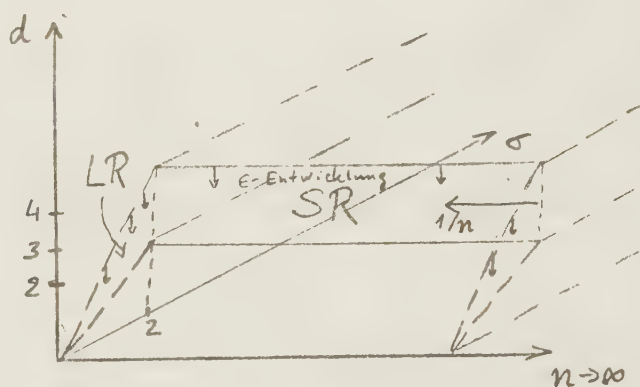
$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{(n+2)}{4(n+8)}\epsilon + \frac{(n+2)}{8(n+8)^2}(n^2 + 23n + 60)\epsilon^2 + \frac{(n+2)}{32(n+8)^3}\{2n^4 + 89n^3 + 1412n^2 + 5904n + 8640 - 192(5n+22)(n+8)T\}\epsilon^3$$

von Skalenfunktionen und Amplituden^{110,111} und in jüngerer Zeit der gesamte Bereich der Dynamik kritischer Phänomene¹¹²⁻¹¹⁶.

In dieser Arbeit werden wir uns aber intensiver mit der $1/n$ -Entwicklung beschäftigen, die meistens als Ergänzung der ϵ -Entwicklung benutzt wird und die das Bild der (n,d) -Struktur kritischer Exponenten abrundet¹¹⁷. Gemeint ist, daß der physikalisch interessante Parameter-Bereich der (n,d) -Ebene von zwei Seiten, ausgehend von exakt lösbaren Modellen, untersucht wird (siehe Skizze)



kurzreichweitige Wechselwirkungen
 $V(x) \propto x^{-d-\sigma}$, $\sigma = 2$



beliebige Reichweite $\sigma > 0$

c. Diagrammentwicklung in $1/n$

Die $1/n$ -Entwicklung geht von der exakten Lösung bei $n=\infty$, dem "sphärischen Limes"^{13,118-122} resp. dem sphärischen Modell, was nach Stanley völlig äquivalent ist, und benutzt die Abschätzung $u_0 = O(1/n)$ und damit, wie bei der ϵ -Entwicklung, u_0 als kleinen Entwicklungsparameter. Die Diagramme werden für diskrete ganzzahlige n abgezählt und ausgewertet. Anschließend wird das erhaltene Ergebnis auf kontinuierliche n fortgesetzt und diskutiert. Wir wollen hier nur die methodischen Unterschiede zur ϵ -Entwicklung hervorheben. Wir benutzen wieder die Gln. (1)-(4) und erhalten anstelle von Gl. (5) in $O(n^0)$

$$\begin{aligned}
 0 &= * + \frac{Q}{u_0} \\
 &= r_0 - r + \frac{n u_0}{6} \frac{K_d}{2} \int_0^{\hat{}} dp^2 p^{2-\epsilon} \frac{1}{p^2+r} + O(1/n) \\
 &= r_0 - r_{oc}(0) - r + \frac{n u_0 K_d}{12} \mathcal{B}(1-\epsilon/2, \epsilon/2) r^{1-\epsilon/2}, \quad r \ll (\epsilon/2)^{2/\epsilon} \Lambda
 \end{aligned} \tag{12}$$

$$\Rightarrow t \equiv r_0 - r_{oc}(0) \sim r^{1-\epsilon/2} \quad \text{für } r \rightarrow 0$$

$$\Rightarrow \gamma = 1 / (1 - \epsilon/2) + O(1/n)$$

wobei das 'loop-Diagramm' hier nur von niedrigster Ordnung, ie $O(n^0)$, ist, weil jede freie Summation über alle Komponenten einen Abzählfaktor n beiträgt und so eine Potenz von $1/n$ aus u_0 zu $O(1)$ kompensiert, womit schon das allgemeine Schema der $1/n$ -Entwicklung zur Einteilung von Diagrammen nach Potenzen in $1/n$ erklärt ist.

Man wird bemerken, daß wir in (12) nicht alle $O(1)$ -Diagramme hingeschrieben haben, denn aus Gl.(4) folgt

$$\begin{aligned} 0 &= (* + \text{O}) + (\text{O} + \text{O}) + (\text{O} + \text{O}) + \dots \\ &= (* + \text{O}) (1 + \text{wavy}) \end{aligned} \quad (13)$$

$$\text{mit } \text{wavy} = \text{O} + \text{O} + \text{O} + \dots$$

wobei die rechte Klammer stets positiv definit ist, so daß diese ursprüngliche Selbstenergiebedingung tatsächlich durch (12) erfüllt wird.

Wir verzichten hier auf die erstmals von Brezin und Wallace berechnete $O(1/n)$ -Korrektur für χ^{118} etc., da diese aus unseren nachfolgenden Rechnungen für das anisotrope Modell unter der Bedingung $g=\text{konst.}$ und $m \rightarrow n$ zu entnehmen sind. Ein wesentlicher Vorteil gegenüber der ϵ -Entwicklung ist, daß durch die Potenzierung der logarithmischen Terme in $O(1/n)$ kritische Exponenten unabhängig von u_0 und damit bereits in universeller Form resultieren. Zwar besitzt auch hier u_0 einen kritischen Wert bei T_c , jedoch erscheint u_0 nur noch in Amplituden, die überdies noch nichtuniversell sind. Im Gegensatz zur ϵ -Entwicklung ist der kritische Wert von u_0 wegen seiner Impuls-cutoff-Abhängigkeit ($\propto \Lambda^{\epsilon_2}$) schon in niedrigster Ordnung nichtuniversell¹¹⁸. Diese Λ -Abhängigkeit von u_0 fällt bei der Berechnung der Exponenten nach höheren Ordnungen von ϵ wieder heraus.

Die $1/n$ -Entwicklung, die von der schwachen und glatten n -Abhängigkeit der kritischen Exponenten profitiert, liefert in $O(1/n)$ im allgemeinen für $n=3$ und manchmal für $n=2$ noch vernünftige Ergebnisse. Andererseits besagt die ϵ -Entwicklung, bei der die Nenner der Koeffizienten von ϵ^n -Termen (n beliebig) Potenzen von $n+8$ sind, daß man eher nach $n+8$ bzw. $(n+2)/(n+8)^2$ (nach Suzuki¹¹⁹) entwickeln sollte und eine Entwicklung nach $1/n$ erst für $n \geq 8$ verlässlich sein sollte. Die bisher einzige bis $O(1/n^2)$ ausgeführte Rechnung für η in $d=3$ ¹¹⁵ läßt jedoch auf sehr gute numerische Werte schon für $n=3$ schließen, die mit denender HTE vergleichbar sind. Abgesehen von diesen Vermutungen ist der gegenseitige Test beider

Methoden im gemeinsamen Gültigkeitsbereich kleiner ϵ und großer n von praktischer Bedeutung. Schließlich gibt es Fälle, z.B. kubisch anisotrope Modelle, bei denen die $O(n^0)$ -Approximation bereits einen Effekt beschreibt, der erst in $O(\epsilon^1)$ zu erkennen ist.

Wir beschließen diese kurze Diskussion mit dem Hinweis auf die in Fig. 10 gezeigten Zeichnungen der Niveaulinien kritischer Exponenten im (n,d) -Raum, in denen sich $O(1/n)$ -Rechnungen von Shang-keng Ma, Abe, Suzuki und anderen harmonisch mit denen der ϵ - Entwicklung ergänzen und u.a. dadurch Hinweise auf die Werte der Exponenten bei $(d=2)$ -Modellen geben.

III. Anwendungen der Wilson-Theorie auf allgemeine n-Vektor Modelle

1. n-Vektor Modelle für magnetische und strukturelle Phasenübergänge mit axialer Anisotropie.

Wir betrachten zuerst anisotrope Heisenberg-Modelle mit n-komponentigem Ordnungsparameter. Als Beispiel sei das im druckfreien Fall kubische CrBr_3 mit drei kritischen Komponenten erwähnt, bei dem axiale Anisotropie alleinige Folge anisotrope äußeren Drucks ist. Die am Phasenübergang sinnvolle kontinuierliche Version des Modells stellt eine Erweiterung des in II.4.a betrachteten Modells auf beliebige n dar. Wir werden zur Vereinfachung alle irrelevanten Störungen schon im Ausgangs-Hamiltonian vernachlässigen. Wie wir bereits in II.4 diskutiert haben, läßt sich ein anisotropes Heisenberg-Modell der Form

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=1}^n J_{ij}^{\alpha} \hat{S}_i^{\alpha} \hat{S}_j^{\alpha}, \quad J_{ij}^{\alpha} = J_{ij} - c g_{\alpha} \quad (1)$$

am Phasenübergang mit endlichem T_c durch das folgende klassische Wilson-Modell ersetzen:

$$H \equiv \beta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_x \sum_{\alpha=1}^n (r_{0\alpha} S_{\alpha}^2(x) + (\nabla S_{\alpha}(x))^2) + u_0/4! \int_x \sum_{\alpha,\beta} S_{\alpha}^2(x) S_{\beta}^2(x) \quad (2)$$

$$\text{mit } r_{0\alpha} = r_0 + g_{\alpha} \quad \text{und} \quad r_0 = T - T_{c0}$$

Die Parameter des Wilson-Modells sind völlig durch die des diskreten Modells gegeben¹⁰⁰. Insbesondere gehört zu einer mittels $c g_{\alpha} < 0$ stärkeren Austausch-Kopplung $J_{\alpha} = J - c g_{\alpha}$ ein gegenüber dem isotropen Wert verkleinerter s^2 -Koeffizient $r_{0\alpha} = r_0 + g_{\alpha}$ im Wilson-Modell. Wir interessieren uns speziell für $d=3$ und $n=3$ und durften daher kubische Anisotropien in $O(s^4)$ im Spinraum bzw. in $(\nabla S)^2$ im Ortsraum sowie die axiale Anisotropie im S^4 -Term, die sämtlich symmetriee erlaubt sind, wegen ihrer Irrelevanz vernachlässigen. Während die Vernachlässigung der Anisotropie in $O(s^4)$ für alle bekannten physikalischen Magnete ($n \leq 3$) gerechtfertigt ist, müssen für $n \geq 4$ zusätzlich zu (2) relevante kubische Störungen berücksichtigt werden. Für die Zwecke dieses Abschnitts genügt Modell (2), denn wir wollen die $1/n$ -Entwicklung in $O(1/n)$ als Approximation für Systeme mit maximal drei kritischen Komponenten verwenden. Andererseits wird sich herausstellen, daß die $O(1/n)$ -Rechnung dann auch für große n eine gute Näherung ergibt, wenn die kubische Anisotropie klein ist.

Die exakte Lösung des Gauß-Anteils von Modell (2) ergibt wie die MFA von (1), daß die Komponenten mit dem größten J_α bzw. dem kleinsten r_α zuerst ordnen, dh kritisch werden, und demzufolge die kritische Temperatur bestimmen. Danach erhöht sich also die kritische Temperatur linear mit g . Für $g \rightarrow 0$ werden allmählich alle Komponenten kritisch, was als crossover bezeichnet wird.

Eine völlig analoge Situation ergibt sich bei Perowskiten wie SrTiO_3 und LaAlO_3 , wobei wir nur die Spins des magnetischen Problems durch die lokalen Normalkoordinaten Q_α des Thomas-Müller-Modells zu ersetzen haben. Wie zuvor erhalten wir durch Vernachlässigung irrelevanter Terme bei beliebigem anisotropem Druck den Hamiltonian

$$\beta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{x}} \sum_{\alpha=1}^n \left[(r_\alpha + g_\alpha) Q_\alpha^2(\mathbf{x}) + (\nabla Q_\alpha(\mathbf{x}))^2 \right] + \frac{u_0}{4!} \int (\sum_{\alpha} Q_\alpha^2(\mathbf{x}))^2 \quad (3)$$

$$\text{mit } g_\alpha \equiv c_\alpha g, \quad \sum_{\alpha} c_\alpha = 0 \quad \text{und} \quad \underline{r_\alpha \propto 1/T}$$

wobei für SrTiO_3 etc. $n=3$ zu setzen ist. Da wir $T_c \neq 0$ vorausgesetzt haben, durften wir unter Vernachlässigung von irrelevanten Termen der Form $O(T-T_c)(\nabla Q)^2$ den Vorfaktor von $(\nabla Q)^2$ auf $1/2$ fixieren, während die wesentliche Temperaturabhängigkeit in BH durch $r_\alpha \propto 1/T$ gegeben ist. In Analogie zum Spin-Modell erhalten wir damit auch: $r_\alpha - r_\alpha \equiv r_c - r_\alpha(r=0) \propto T-T_c$.

Für die Interpretation der Ergebnisse muß man noch wissen, wieviele Komponenten bei welchem Druck leicht werden. Bei dem von Müller et al gemessenen Fall des (111)-Drucks resultieren aus dem TM-Modell eine leichte und zwei gleich schwere Komponenten bei positivem Druck. Dabei wurden durch (111)-Druck induzierte Kopplungen der Form $Q_1 Q_2$ durch Diagonalisierung in die Q^2 -Terme des Modells (3) transformiert wobei der $O(Q^4)$ -Teil wegen der Isotropie unverändert blieb.

Die Vernachlässigung der irrelevanten kubischen Störungen ist, auch wenn man sich nicht für Korrekturen zum führenden kritischen Verhalten interessiert, beim ausgeprägt kubischen SrTiO_3 unter bestimmten Bedingungen problematisch. Da auch u_0 und die Kopplungskonstante Δ_0 der kubischen Störung druckabhängig sind, kann beispielsweise unter geeigneten isotropen Druck der Hamiltonian die Symmetriebeziehung des instabilen kubischen Fixpunkts annehmen, was dann zu kubisch-trikritischem Verhalten führt^{18,127}. Daher haben

wir mittels $\sum_{\alpha} c_{\alpha} = 0$ diese Möglichkeit eingeschränkt. Allerdings könnte kubisch trikritisches Verhalten auch bei anisotropem Druck unter noch nicht geklärten Umständen möglich sein. Eine Erscheinungsform kubisch-trikritischen Verhaltens wird in Kap. III.3a diskutiert.

Die Irrelevanz der kubischen Störungen betreffend, wollen wir noch auf die RG-Analyse von Cowley and Bruce¹²⁵ verweisen, in der die Vernachlässigbarkeit der für $n=3$ und $d=3$ gegebenen Kopplung der Ortsraum- und Q-Raum-Anisotropie in $O(\epsilon)$ erstmals gezeigt wurde.

Im folgenden betrachten wir nur anisotropen Druck und vollständig isotrope Q^4 -Wechselwirkung. Für dieses Modell wollen wir in der $1/n$ -Entwicklung bis $O(1/n)$ das Verhalten der Suszeptibilität im gesamten kritischen Bereich der (t, g) -Ebene oberhalb $T_c(g)$ studieren. Da man bei der $1/n$ -Entwicklung in Wilson's nicht-renormierter Diagrammtheorie den freien Vierpunkt-Vertex u_0 als Entwicklungsparameter benutzt, beginnen wir mit Abschätzung der Größenordnung von u_0 mittels der Energiefunktion des anisotropen Modells:

Aus thermodynamischen Gründen muß man verlangen, daß die Energie proportional zur Anzahl der Feldkomponenten zunimmt, d.h. $\langle H \rangle = O(n)$. Weiter definieren wir $r_{0\alpha} = O(1)$ für alle α und fordern, daß alle Suszeptibilitäten $O(1)$ sind. So folgt $\langle \sum_{\alpha} Q_{\alpha}^2 \rangle = O(n)$ und $\langle (\sum_{\alpha} Q_{\alpha}^2)^2 \rangle = O(n^2)$, woraus sich die Größenordnung der Kopplungskonstanten als $u_0 = O(1/n)$ ergibt. Für ein linear an Q koppelndes Feld H resultiert $H = O(\sqrt{n})$.

Somit ändert die axiale Anisotropie die Größenordnung des Entwicklungsparameters nicht, und wir können prinzipiell wie in Wilson's isotropem n -Vektor Modell vorgehen:

Dazu definieren wir zuerst die exakten Suszeptibilitäten für impuls null (d.h. eigentlich Impulsdifferenz null bezüglich dem kritischen Impuls, der die Ordnung beschreibt) als

$$r_{\alpha}^{-1} = \int_x \langle Q_{\alpha}(x) Q_{\alpha}(0) \rangle \quad \text{mit } r_{\alpha}^{-1} = \chi_{\alpha} = \begin{cases} \chi_{\parallel} & \text{wenn } \alpha=1\dots m \\ \chi_{\perp} & \text{wenn } \alpha=m+1\dots n \end{cases} \quad (4)$$

Die m $\chi_{\parallel}(q=0)$ beschreiben die divergierende Antwort des Systems bei $T_c(g)$ auf eine an $Q_{\parallel}$ linear ankoppelnde homogene Störung,

während die restlichen $n-m$ $\chi_1(q=0)$ nicht divergieren, wohl aber Effekte kritischer transversaler Fluktuationen widerspiegeln. Die Einteilung der r_α in zwei äquivalente Gruppen genügt nicht, um etwa bei $n=3$ den Fall orthorhombischer Anisotropie mit drei inäquivalenten Komponenten zu erfassen, jedoch können 'drittleichste' und schwerere Felder keinen neuen Typ von kritischem Verhalten erzeugen.

Den diskutierten Hamiltonian ergänzen wir so, daß die r_α die Rolle der $r_{0\alpha}$ als Temperaturmaß übernehmen können. Entscheidend dabei ist, daß mittels $r_\parallel$ mit der Eigenschaft $r_\parallel = 0 \Leftrightarrow T = T_c(g)$ eine Fixpunkt-lokalisierende Größe in die Diagrammtheorie eingeführt wird. Wir benutzen also das folgendermaßen umgegliederte Modell (3)

$$\begin{aligned}\beta \mathcal{H} &= \beta \mathcal{H}_0 + \beta \mathcal{H}_i \\ \beta \mathcal{H}_0 &= \frac{1}{2} \int_x \sum_\alpha \left[r_\alpha Q_\alpha^2(x) + (\nabla Q_\alpha(x))^2 \right] \\ \beta \mathcal{H}_i &= \frac{1}{2} \int_x \sum_\alpha (r_{0\alpha} - r_\alpha) Q_\alpha^2(x) + \frac{u_0}{4!} \int_x \left(\sum_\alpha Q_\alpha^2(x) \right)^2\end{aligned}\quad (5)$$

wobei die Normierung der Anisotropie-Parameter durch folgende Konvention erzielt wird:

$$r_{0\alpha} = r_0 + c_\alpha g, \quad c_\alpha = \begin{cases} c_\parallel = -\frac{n-m}{n} & \text{für } \alpha = 1..m \\ c_\perp = m/n & \text{für } \alpha = m+1..n \end{cases} \quad (6)$$

Durch diese Wahl ist $\sum_\alpha c_\alpha = 0$ und $c_\perp - c_\parallel = 1$ gegeben. Es sei daran erinnert, daß negative $c_\alpha g$ eine Verstärkung der 'Austauschwechselwirkung' zwischen den Komponenten α darstellen. Die Bedingung

$\sum_\alpha c_\alpha = 0$ bedeutet physikalisch, daß wir keinen isotropen Druck berücksichtigen, der nichts am kritischen Verhalten ändern kann und lediglich die kritische Temperatur verschiebt.

Da das anisotrope Gauß-Modell wegen der Unabhängigkeit aller Komponenten genauso leicht zu lösen ist wie das isotrope, kann man unter Benutzung der jeweiligen Zerlegung des Hamiltonians angemessenen Dyson-Gleichung die hier vorkommenden Propagatoren aufschreiben:

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H}_0(\{r_{0\alpha}\}) & \quad \beta \mathcal{H}_0(\{r_\alpha\}) & \quad \beta \mathcal{H} \\ \mathcal{G}_{0\alpha}(q) &= (q^2 + r_{0\alpha})^{-1} \quad , \quad \mathcal{G}_{\alpha\alpha}(q) = (q^2 + r_\alpha)^{-1} \quad , \quad \mathcal{G}_\alpha(q) = (q^2 + r_\alpha - \tilde{\Sigma}_\alpha(q))^{-1} \\ & & & = (q^2 + r_{0\alpha} - \Sigma_\alpha(q))^{-1} \end{aligned} \quad (7)$$

wobei offenbar $\tilde{\Sigma}_{\alpha}(q) = \Sigma_{\alpha}(q) + r_{\alpha} - r_{0\alpha} = \Sigma_{\alpha}(q) - \Sigma_{\alpha}(0)$ sein muß, was mit $\Sigma_{\alpha}(0) = r_{0\alpha} - r_{\alpha}$ unserer Forderung entspricht, daß r_{α} der exakte freie Propagator für $q=0$ sein soll. Die für die folgenden Rechnungen zentralen Gleichungen, die die Temperatur -ausdrückt durch das alte Maß r_0 von Modell (3) - die Anisotropie und die Suszeptibilität verknüpfen, lauten

$$r_{0\alpha} = r_{\alpha} + \Sigma_{\alpha}(0, \{r_{\beta}\}) \quad \text{oder} \quad r_0 = -c_{\alpha}g + r_{\alpha} + \Sigma_{\alpha}(0, \{r_{\beta}\}) \quad (8)$$

Wir betrachten zum Zwecke der einfachstmöglichen Abgrenzung verschiedener Probleme zunächst den sphärischen Limes. Die Resultate in diesem Limes dürfen wir mit denen des axial anisotropen sphärischen Modells identifizieren, denn Stanley's Argumente gelten hier wie im isotropen Fall (s.II.1).

Vom Standpunkt der Diagrammtopologie aus ist es leicht, Diagrammklassen nach Potenzen von $1/n$ zu identifizieren. Die Regel, daß jede freie Summation in irgendeinem Diagrammteil einen Faktor $O(n)$ beiträgt, der den Faktor $O(1/n)$ eines freien Vierpunkt-Vertex kompensiert, gilt auch im axial anisotropen Modell. Daher erhalten wir in $O(1)$ folgende Diagrammentwicklung für die Korrelationsfunktion $G_{\alpha}(q^2)$

$$\begin{aligned} \overline{\overline{q, \alpha}} &= \overline{q, \alpha} + \overline{q, \alpha} \times \overline{q, \alpha} + \overline{q, \alpha} \overset{\int q' \Sigma_{\alpha'}}{\cap} \overline{q, \alpha} \\ &+ \overline{q, \alpha} \circ \overline{q, \alpha} + \overline{q, \alpha} \circ \overline{q, \alpha} \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (9)$$

wobei mittels $\overline{\overline{q=0, \alpha}} = \overline{q=0, \alpha}$ (ie $G_{\alpha}(0) = G_{\alpha 0}(0)$) der Zweipunkt-Vertex $\times = r_{0\alpha} - r_{\alpha}$ für jede Komponente so gewählt ist, daß er gerade die andere impulsunabhängige Selbstenergie $\cap$ kompensiert. Dann kompensieren sich auch alle Zweiergruppen auf der rechten Seite von (9). Diese Selbstenergiebedingungen

$$0 = \alpha \times_{\alpha} + \alpha \overset{q, \alpha'}{\cap} \alpha \quad (10)$$

sind gerade die graphischen Darstellungen der Gleichungen (8). Somit wird auch klar, daß $\Sigma_{\alpha}(q) - \Sigma_{\alpha}(0) = O(1/n)$ und $G_{\alpha}(q) = (q^2 + r_{\alpha})^{-1} +$

$O(1/n)$. Daraus folgt wegen $G_{\parallel}(q, T=T_c(g)) \propto q^{-2+\eta}$ wie im isotropen Fall $\eta=O(1/n)$.

Die Selbstenergiebedingungen liefern uns nun

$$r_{o\perp} = r_{\alpha} - \frac{m u_0}{6} \int_p (p^2 + r)^{-1} - \frac{(n-m) u_0}{6} \int_p (p^2 + r_{\perp})^{-1} \quad (11)$$

Wir benutzen bei der Impuls-Integration einen scharfen Abschneideimpuls Λ . Durch Subtraktion der Gleichung für $r_{o\parallel}$ von der $r_{o\perp}$ finden wir den im sphärischen Modell simplen Zusammenhang zwischen senkrechter und paralleler Suszeptibilität als

$$r_{\perp} = r_{\parallel} + g \quad \text{oder} \quad \chi_{\perp} = \frac{1}{\chi_{\parallel}^{-1} + g} \quad (12)$$

In dieser Näherung hat es offenbar noch den Anschein als gelte $\frac{\partial r_{\perp}}{\partial T} = \frac{\partial r_{\parallel}}{\partial T}$. Das ist aber nur die Folge der Abwesenheit anharmonischer Beiträge in dieser Ordnung.

Setzen wir nun (12) in (11) ein und benutzen die bekannten Integrale, so folgt für $r, g \ll \Lambda^2$ (wo im Folgenden $r \equiv r_{\parallel}$ definiert ist)

$$t = r_o - r_{oc}(0) = r + \frac{n-m}{n} g + m u_0 c r^{1-\epsilon/2} + (n-m) u_0 c (r+g)^{1-\epsilon/2} \quad (13)$$

oder wenn die reduzierte Temperatur von der kritischen Linie aus bei konstantem g gemessen wird, ie $\dot{t} = T - T_c(g)$ anstatt $t = T - T_c(0)$,

$$\dot{t} = r_o - r_{oc}(g) = r + m u_0 c r^{1-\epsilon/2} + (n-m) u_0 c ((r+g)^{1-\epsilon/2} - g^{1-\epsilon/2}) \quad (14)$$

wo mit $r_{oc}(g)$ der kritische Wert von r_o bei $T_c(g)$, also $r_o(r=0, g)$, gemeint ist und $6c = (K_d/2) \int_0^{\infty} dx \quad x^{-\epsilon/2}/(x+1) = 2^{-d} \pi^{-d/2} \Gamma^{-1}(d/2) \times B(1-\epsilon/2, \epsilon/2)$.

Die beiden obigen Gleichungen hängen offenbar über die Verschiebung der kritischen Temperatur $t_c(g) = T_c(g) - T_c(0)$ miteinander zusammen. Nach Konstruktion lokalisiert $r=0$ die kritische Linie. Somit findet man

$$t_c(g) = \frac{n-m}{n} g + (n-m) u_0 c g^{1-\epsilon/2} \quad (15)$$

Bei geeignet gewähltem zusätzlichem isotropen Druck kann man auch das in g lineare Glied zum Verschwinden bringen.

Aus der Gleichung (13) lesen wir einige wesentliche Eigenschaften des kritischen Bereichs der $(T \geq T_c(g), g)$ -Ebene ab:

für $d > 4$, d.h. negatives ϵ , reduziert sich Gl. (13) in der Nähe der kritischen Kurve (sehr kleines r) auf die Molekularfeld-Lösung

$$\chi_{||} = r^{-1} = \frac{1}{t - \frac{n-m}{n} g} = 1/t \quad (16)$$

mit dem kritischen Exponent $\dot{\chi}=1$ und der Erhöhung der kritischen Temperatur gemäß $T_c(g) = T_c(0) + \frac{n-m}{n} g$. Die Erhöhung der Übergangstemperatur ist als Erleichterung des Phasenübergangs etwa durch Verstärken der Austauschwechselwirkung der m ordnenden Komponenten zu verstehen; bei SrTiO_3 begünstigt Druck die trigonale Verzerrung gegenüber der tetragonalen Ordnung für $g=0$ und führt so zu einer neuen Symmetrie der geordneten Phase und gleichzeitig zur Erhöhung der kritischen Temperatur.

Nach der Definition der Exponenten in Kap. I erhalten wir aus den obigen Gln. für $d > 4$ den Molekularfeldsatz $\chi = \dot{\chi} = \varphi = \psi = 1$.

Wir sparen den Fall $d=4$ mit logarithmischen Beiträgen aus und wenden uns im Folgenden dem interessanten Bereich $2 < d < 4$ zu, in dem das sphärische Modell auch noch einen Phasenübergang hat (bei $d=2$ ermöglicht $r^{1-\epsilon/2} = \text{const}$ nicht mehr $\dot{t} \rightarrow 0$) und wo die $u_0(s^2)^2$ -Störung relevant ist. Das sieht man in Gl. (14) daran, daß die führenden Terme für $r \rightarrow 0$ jetzt durch $r^{1-\epsilon/2}$ und $rg^{-\epsilon/2}$ als Korrektur gegeben und proportional u_0 sind. Die Molekularfeldterme sind nur noch eine weitere Korrektur. Man erhält also die Werte $\chi = \dot{\chi} = 1/(1-\epsilon/2)$ des sphärischen Modells. Die (n,d) - bzw. (m,d) -Struktur von χ bzw. $\dot{\chi}$ ist im sphärischen Limes natürlich auf eine d -Struktur verkürzt. Bemerkungswert ist auch, daß die Amplitude des führenden Terms in (14) umso kleiner wird je weniger kritische Komponenten mitwirken. Dadurch kommt es für $m/n \rightarrow 0$ wieder zu einem crossover zum Molekularfeldverhalten, das unter der Bedingung $r/g > (\frac{m}{n-m})^{2/\epsilon} \sim (m/n)^{2/\epsilon}$ auftritt. Bekanntermaßen sieht man (auch in der Realität) immer einen crossover von kritischem (hier SM) Verhalten zum sog. trivial kritischen MF-Verhalten, nämlich beim Verlassen des kritischen Bereichs. Dies läßt den Schluß zu, daß die Breite des kritischen Bereichs proportional zu $(m/n)^{2/\epsilon}$ und damit von $O(1)$

für $m=O(n)$, aber $\propto n^{-2/\epsilon}$ für $m=O(1)$ ist. Daher sieht man im extrem anisotropen ($m=O(1)$) SM nur das MF-Potenzverhalten. Der direkte Vergleich zwischen der Molekularfeld-Lösung und der des extrem anisotropen Modells mit $m=O(1)$ läßt sich anhand der parallelen Suszeptibilität durchführen, die wir nach der Skalentheorie als verallgemeinerte homogene Funktion ihrer Variablen g und t notieren wollen

$$\chi(g, t) = A t^{-\gamma} X(Bg/t^\varphi)$$

$$\text{hier: } \chi_{SM}^{(0)}(g, t) = A_{SM} t^{-\gamma_{SM}} X_{SM}^{(0)}(x) \quad \text{mit } x = A_{SM} g/t^{\varphi_{SM}} \quad (17)$$

wobei $X(x)$ als Skalenfunktion der Skalenvariablen x bezeichnet wird, und X_{SM} , A_{SM} und φ_{SM} die Werte im sphärischen Limes bedeuten. Die Skalen-Funktion hat tatsächlich exakt die Molekularfeldform (siehe Gl. (16) für $m/n=0$)

$$X_{SM}^{(0)}(x) = 1 / (1-x) \quad (18)$$

Allerdings sind die Skalenvariablen verschieden, nämlich $x=g/t$ in der MFA und $x=Bg/t^\varphi$ mit $B=(nu_0c)^\varphi$ und $\varphi=1/(1-\epsilon/2)+O(1/n)$ im extrem anisotropen sphärischen Modell. Im Bereich $x \approx 1$ findet man asymptotisch nahe bei $T_c(g \neq 0)$ exakte Übereinstimmung beider Modelle mittels

$$\chi_{MF} = \chi_{SM}^{(0)} = 1/t \quad \text{für } t \rightarrow 0 \quad (19)$$

Die Verschiedenheit der Skalenvariablen hängt mit der der cross-over-Exponenten zusammen. Diese sind im isotropen Punkt ($r=0, g=0$) definiert und sind daher $\varphi_{MF}=1$ und $\varphi_{SM}=1/(1-\epsilon/2)$.

Für $g \rightarrow 0$ spürt man außer der Unterschiedlichkeit der φ 's auch die große Verlagerung der isotropen kritischen Punkte gemäß

$$r_{oc}(0) = T_c^{SM}(0) - T_{co}(0). \quad (20)$$

Daß diese beiden Gesichtspunkte aber eng zusammenhängen, erkennt man aus Fig.11 (S.54): da man von jedem Modell außerhalb des kritischen

Bereichs MF-Verhalten erwartet, wird $r_{oc}(0)$ umso größer sein (betragsmäßig) je mehr sich φ von dem Molekularfeldwert 1 unterscheidet.

Wir betrachten nun das anisotrope sphärische Modell mit einer relevanten Anzahl $m=O(n)$ kritischer Komponenten:

Für jeden endlichen Wert von m/n ist der kritische Bereich groß genug, daß man für $T \rightarrow T_c (q \neq 0)$ oder $x \rightarrow 1$ (in der Skalenfunktion) den crossover zu SM-Verhalten beobachten kann. Dazu benutzen wir wieder die Formulierung mit Hilfe der Skalenfunktion. Einsetzen der skalentheoretischen Annahme

$$\chi_{||}(q, t) = A t^{-\gamma} X(x), \quad x = B q / t^{\varphi} \quad (21)$$

in Gl. (13) liefert zunächst eine implizite Gleichung für die Skalenfunktion $X(x)$:

$$1 - \frac{m}{n} X(x)^{-(1-\epsilon/2)} = \frac{n-m}{n} \left(X^{-1}(x) + \left(\frac{n}{n-m} \right)^{1/(1-\epsilon/2)} x \right)^{1-\epsilon/2} \quad (22)$$

$$\text{mit } x = B q / t^{1/(1-\epsilon/2)}, \quad B = ((n-m)u_0 c)^{1/(1-\epsilon/2)} \quad \text{und} \quad A = (nu_0 c)^{1/(1-\epsilon/2)}$$

wobei A und B aus den gewählten Normierungen $X(0) = 1$ und $x_c = 1$ folgen. Im übrigen hat die Normierung $x_c = 1$ zur Folge, daß das unkritische Verhalten von $X(x)$ für kleine x gegeben ist durch

$$X(x) = 1 + \left(\frac{m}{n-m} \right)^{\epsilon/(2-\epsilon)} x + O(x^2), \quad (23)$$

Wir wissen bereits aus der Skalentheorie^{128,129}, daß $X(x)$ für $x \rightarrow 1$ von folgender Form sein muß

$$X(x) = \dot{X} (1-x)^{-\dot{\gamma}} \quad (24)$$

wobei allerdings X , B und φ unbestimmt sind.

Es ist klar, daß die Singularität der Suszeptibilität im Bereich $x \sim 1$ alleine in der Skalenfunktion steckt. Daher können wir die Gl. (22) dort nach $X^{-1}(x)/x$ entwickeln und erhalten

$$X(x) = \left(\frac{m/n}{1-x^{1-\epsilon/2}} \right)^{1/(1-\epsilon/2)} \quad (25)$$

Bevor wir die Bedeutung der Diskrepanz zwischen (25) und (24) diskutieren, können wir noch im dreidimensionalen Fall Gl. (22) exakt

lösen und erhalten

$$\begin{aligned} X(x) &= \dot{X}(x) (1-x)^{-2} \\ \text{mit } \dot{X}(x) &= \frac{(n-m)^2 - m^2}{m^2} (1-x) \left(\sqrt{1 + \frac{(n-m)^2 - m^2}{m^2} (1-x)} - 1 \right)^{-1} \\ &\approx 2 \frac{m}{n} \left(1 + \frac{(n-m)^2 - m^2}{4 m^2} (1-x) + O((1-x)^2) \right) \end{aligned} \quad (26)$$

Die schwache x -Abhängigkeit von X ist auch schon von Pfeuty et.al.¹²⁹ im Rahmen der Skalentheorie und von Hochtemperatur-Entwicklungen diskutiert worden, so daß wir vollständige qualitative Übereinstimmung zwischen (26), (24) und Ref.129 feststellen. Man kann nun leicht durch Entwicklung nachprüfen, daß (25) mit (24) für beliebiges ϵ ($0 < \epsilon < 2$) und mit (26) für $\epsilon=1$ konsistent ist, denn erstens ist der Unterschied im Exponenten von x innerhalb der Klammer unwesentlich für das asymptotische Verhalten mit $x \rightarrow 1$; zum Zweiten ist der Gültigkeitsbereich dieses Verhaltens durch den mit t anwachsenden Einfluß von Korrekturtermen limitiert, wobei die Größenordnung dieser Korrekturen gerade gleich der der Differenz zwischen (25) einerseits und (24) sowie (26) andererseits ist. In unserer Entwicklung nach X^{-1}/x im Bereich $r \ll g$ hatten wir Terme der Größenordnung $rg^{-\epsilon/2}$ gegen $r^{1-\epsilon/2}$ vernachlässigt. Der Faktor $(r/g)^{\epsilon/2}$, um den sich diese Ausdrücke unterscheiden, ist auch als führende Korrektur zum dominierenden Skalenverhalten zu erwarten. Dies schließen wir aus Rechnungen von Brezin et al für isotrope Systeme mit Hilfe der Callan-Symanzik Theorie¹⁰⁶. Danach beschreibt der Exponent $\omega = \epsilon/2$ im Sinne von $r^X(1+cr^\omega + \dots)$ die führende Korrektur. Bei einem axial anisotropen sphärischen Modell muß dieser Faktor die Form $(r/g)^{\epsilon/2}$ haben, wenn wir Skalenverhalten voraussetzen. Die Ursache einer derartigen Korrektur liegt wie im isotropen Fall an der 'irrelevanten' r -Abhängigkeit von u_0 , hier $u_0 = u_{0c} + \text{const.} (r/g)^{\epsilon/2}$. In unseren Rechnungen wird nur das führende kritische Verhalten berücksichtigt, indem wir u_0 als konstant und damit konsistenterweise gleich u_{0c} gesetzt denken.

Abschließend sei zur Lösung im sphärischen Limes gesagt, daß

wir die sogenannte kritische Amplitude der Suszeptibilität erst in $O(1/n)$ diskutieren werden, wobei man unter kritischer Amplitude den Vorfaktor des singulären $(T-T_c(g))^{-\dot{\chi}}$ -Terms versteht. Da im sphärischen Limes $\chi = \dot{\chi}$ gilt, kann die kritische Amplitude in Abhängigkeit von g hier noch kein singuläres Verhalten zeigen.

Exakte Lösungen in $O(1/n)$ speziell für $m=O(n)$ und $2 < d < 4$

Wir verwenden die Selbstenergiebedingung (8) und sammeln alle $O(1/n)$ -Kontraktionen. Die Diagrammreihe ist dann:

$$0 = \alpha^* \alpha + \left(m \overset{\parallel}{\bigcirc}_{\alpha} + (n-m) \overset{\perp}{\bigcirc}_{\alpha} \right) + \left(m \overset{\parallel}{\bigcirc}_{\alpha}^{\parallel} + (n-m) \overset{\perp}{\bigcirc}_{\alpha}^{\perp} \right) + \overset{\alpha}{\text{---}}_{\alpha} + O(1/n^2)$$

wobei $\text{---} \equiv \bigcirc + \bigcirc\bigcirc + \bigcirc\bigcirc\bigcirc + \dots$

$$= \bigcirc / (1 - \bigcirc) \quad (27)$$

mit $\bigcirc = m \overset{\parallel}{\bigcirc} + (n-m) \overset{\perp}{\bigcirc}$

(in der ersten Zeile sind die äußeren Impulse gleich null)

Der analytische Ausdruck für die Selbstenergiebedingung lautet

$$\begin{aligned} r_{0\alpha} = r_{\alpha} - \frac{m u_0}{6} \int_q G(r, q^2) - \frac{(n-m) u_0}{6} \int_q G(r_1, q^2) \\ - \frac{u_0}{3} \int_q G(r, q^2) \left[1 + \frac{u_0}{6} (m \pi(r, q^2) + (n-m) \pi(r_1, q^2)) \right]^{-1} \\ + \frac{u_0}{3} \int_p \frac{u_0/6}{1 + \frac{u_0}{6} (m \pi(r, p^2) + (n-m) \pi(r_1, p^2))} \left[m \int_q G^2(r, q^2) (G(r, (p+q)^2) - G(r, p^2)) + \right. \\ \left. + (n-m) \int_q G^2(r_1, q^2) (G(r_1, (p+q)^2) - G(r_1, p^2)) \right] \end{aligned} \quad (28)$$

wobei $G(r_{\alpha}, q) = (q^2 + r_{\alpha})^{-1}$ einen bis $O(1/n)$ renormierten ($q=0$)-Propagator und $\pi(r_{\alpha}, q) = \int_q G(r_{\alpha}, q^2) G(r_{\alpha}, (p+q)^2)$ eine Blase bezeichnet. Nichtdiagonalelemente der Matrix $\pi_{\alpha\beta}$ treten auch auf, jedoch tragen diese $\pi_{\alpha\beta}$ erst in $O(1/n^2)$ etwas bei, da wegen der Kopplung an den nächsten Diagrammteil die freie interne Summation über die Komponenten fehlt. Es ist dabei noch zu bemerken, daß der volle 4-Vertex, der sich im wesentlichen aus den Blasen $\pi_{\alpha\alpha}$ aufbaut, die durch den Hamiltonian gegebene Symmetriebedingung

$$\Gamma_{\alpha\beta\gamma\delta}(0 \dots 0) = \frac{\int_{x,y,z} \langle S_{\alpha}(x) S_{\beta}(y) S_{\gamma}(z) S_{\delta}(0) \rangle^{\text{Glu}}}{\int_{\alpha}(0) \int_{\beta}(0) \int_{\gamma}(0) \int_{\delta}(0)} \sim \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \text{Perm.} \quad (29)$$

erfüllen muß.

Der erste Schritt zur Lösung von Gl. (28) besteht wieder darin, die senkrechte Suszeptibilität $r_{\perp}^{-1}$ durch r und g auszudrücken. Ursprünglich wurden die obigen Ausdrücke entlang der vereinfachenden Wege mit 1. g konstant, 2. $r=0$ und die Ableitung von (28) nach g bei $g=0$ untersucht, was zur Ableitung der kritischen Exponenten γ, γ' und φ genügte. Wir gehen hier so vor, daß die Suszeptibilitäten für beliebige r und g innerhalb der Bereiche $r \ll g^{1/\varphi}$ und $g \ll r^{1/\gamma}$ berechnet werden. An diesen Ergebnissen wollen wir dann die spezielle Information, die durch kritische Exponenten gegeben ist, extrahieren und diskutieren.

Durch geeignete Subtraktion wie im sphärischen Limes finden wir für die inverse Suszeptibilität

$$r_{\perp} = g + r + \frac{n_0}{3} \int_q \left(\frac{1}{q^2 + r_{\perp}} - \frac{1}{q^2 + r} \right) \left[1 + \frac{n_0}{6} (m \pi(r, q^2) + (n-m) \pi(r_{\perp}, q^2)) \right]^{-1} \quad (30)$$

In dem $O(1/n)$ -Anteil dieses Ausdrucks darf man $r_{\perp}$ durch $r+g$ ersetzen. Um alle führenden Beiträge in r als auch in g im Bereich $x \lesssim 1$ ($r \ll g$) nahe der kritischen Kurve zu bekommen, teilen wir die Brillouin-Zone in drei Bereiche auf (in einem speziellen Fall sogar in 4 Bereiche), in denen die Integranden sinnvoll approximiert werden können.

Es ist zweckmäßig, zunächst die exakte Lösung für den Polarisationsanteil aufzuschreiben (s. Ref. 13, siehe auch Anhang V.b)

(31)

$$\pi(r, q^2) = \frac{\pi(0,1)}{(4r+q^2)^{\epsilon/2}} F\left(\frac{\epsilon}{2}, \frac{1}{2}, \frac{\epsilon}{2}; \frac{4r}{4r+q^2}\right) + \frac{2\pi(0,1) \Gamma(2-\epsilon)}{(\frac{\epsilon}{2}-1) \Gamma^2(1-\epsilon/2)} \frac{r^{1-\epsilon/2}}{4r+q^2} F\left(\frac{3}{2}-\frac{\epsilon}{2}, 1, 2-\frac{\epsilon}{2}; \frac{4r}{4r+q^2}\right)$$

Von Brezin und Wallace ist bereits beim isotropen n -Vektor Modell bemerkt worden, daß relevante Beiträge nur aus dem Bereich $q^2 \gg r$ kommen: für $q^2 \gg r$ erzeugt $\pi^{-1}(r, q^2) \propto q^{\epsilon}$ durch Kompensation des $q^{-\epsilon}$ -Faktors des Volumenelements $d^d q$ einen logarithmischen Beitrag $O(1/n) r^{1-\epsilon/2} \ln r$ im stärksten Diagramm, während für $q^2 \ll r$ mit $\pi^{-1}(r, q^2) \propto r^{\epsilon/2}$ lediglich ein $O(1/n)r$ -Beitrag resultiert. Der physikalische Grund für die Vernachlässigbarkeit des Impulsbereiches $q^2 \ll r$ liegt darin, daß derart kleinen Impulsen so große Abstände im Kristall entsprechen, über die bei der durch r gegebenen Temperatur noch keine Korrelation vorhanden ist. Daher darf man sich über den Beitrag mit MF-Exponenten nicht wundern. Natürlich gelten diese Überlegungen auch für das anisotrope Modell.

Bei konstanter Anisotropie g kann man die nichtsingulären "Blasen-Diagramme" $\pi(r_{\perp}, q^2)$ in (30) vernachlässigen, wenn man sich nur für Temperatur-Abhängigkeiten interessiert (s. Suzuki¹³²). Wir betrachten dagegen g als kritische Variable, so daß wir im Bereich $q^2 \gg g$ mittels $\pi(r_{\perp}, q) \propto q^{-\epsilon}$ kritische senkrechte Fluktuationen erwarten. Andererseits ist $\pi(r_{\perp}, q^2) \propto g^{-\epsilon/2}$ für $q^2 \leq b'g$, wobei b' in dieser Ordnung konstant ist und gleich 1 gewählt werden darf, so daß nachfolgend skizzierte Aufteilung des Impulsbereiches sinnvoll ist:

$$\begin{array}{c}
 \text{---} r \text{---} \quad \text{---} g \text{---} \\
 0 \quad br \quad b'g \quad \Lambda^2 = (\pi/a)^2 \\
 \quad \quad \quad \rightarrow q^2
 \end{array}
 \quad \begin{array}{l}
 \text{---} : \text{ kritische Bereiche} \\
 r, g \quad \text{bezüglich } r \text{ oder } g
 \end{array}
 \quad (32)$$

Die Irrelevanz von $\pi_{\perp}$ -Beiträgen im Bereich $br \leq q^2 \leq b'g$ ist durch obiges Argument zu verstehen, daß bei der durch r und g beschriebenen Temperatur die Korrelationslänge entlang der schweren Richtungen kleiner ist als $1/\sqrt{bg}$. Im Bereich $b'g < q^2 \leq \Lambda^2$ sind dagegen alle Blasen-Diagramme relevant und wir erhalten schließlich

$$\begin{aligned}
 r_{\perp} = & g + r + \frac{K_d}{m} \int_{br}^{b'g} dq^2 q^{2-\epsilon} \left(\frac{1}{q^2+r+g} - \frac{1}{q^2+r} \right) \pi^{-1}(r, q^2) \\
 & + K_d \int_{b'g}^{\Lambda^2} dq^2 q^{2-\epsilon} \left(\frac{1}{q^2+r+g} - \frac{1}{q^2+r} \right) \left(m \pi(r, q^2) + (n-m) \pi(r_{\perp}, q^2) \right)^{-1}
 \end{aligned}
 \quad (33)$$

Es läßt sich zeigen, daß die drei führenden Terme der Doppel-Potenzreihe von $\pi(r, q^2)$ für $r \ll q^2$ genügen, um alle relevanten Beiträge zu finden. Wir verwenden (s. auch Ref. 13)

$$\begin{aligned}
 \pi(r, q^2) \cong & q^{-\epsilon} \pi(0, 1) \left\{ 1 + 2(1-\epsilon) r/q^2 + O(r^2/q^4) \right. \\
 & \left. + \frac{4 \Gamma(2-\epsilon)}{(\epsilon-2) \Gamma^2(1-\epsilon/2)} r^{1-\epsilon/2}/q^{2-\epsilon} + O(r^{2-\epsilon/2}/q^{4-\epsilon}) \right\}
 \end{aligned}
 \quad (34)$$

Das erste Integral in Gl. (33) ergibt Terme proportional zu $r (\ln r - \ln g)$, das zweite $g \ln g$, während beide einen unerwarteten $r^{1-\epsilon/2} g^{\epsilon/2}$ Beitrag ergeben, der sogar die führende Temperatur-Abhängigkeit der $O(1/n)$ -Terme beschreibt. Das Endresultat lautet dann

$$r_{\perp} = g + r + \frac{2}{n} S_d g \ln g - \frac{2}{m} S_d (3-2\epsilon) r (\ln r - \ln g) - \frac{A_d}{m} r^{1-\epsilon/2} g^{\epsilon/2}$$

wobei $S_d = K_d/2 \cdot \pi^{-1}(0, 1)$. A_d ist eine im allgemeinen nichtuniverselle Konstante (sie ist schwach cutoff-abhängig), die im dreidimensio-

nen Fall approximiert wird durch

$$A_3 \approx 2\pi^{-2} (1 + m^2/n^2) \quad (36)$$

Die Potenzierung der logarithmischen Ausdrücke (s. Kap. II) in (35) ist eindeutig und berührt nicht den isolierten $r^{1-\epsilon/2} g^{\epsilon/2}$ -Term.

Das Resultat ist

$$r_{\perp} = g^{1+2S_d/n} + r^{1-2S_d(3-2\epsilon)/m} g^{2S_d(3-2\epsilon)/m} - \frac{A_d}{m} r^{1-\epsilon/2} g^{\epsilon/2} \quad (37)$$

Die Identifizierung mit den erwarteten Potenzgesetzen der Skalentheorie ist offensichtlich außer für den letzten Term, der zumindest in dieser Ordnung eine lineare Temperatur-Abhängigkeit hat. Das Letztere folgt aus $r^{1-\epsilon/2} \propto \dot{t}$, wobei der Exponent nur bis $O(n^0)$ bekannt ist, denn der Vorfaktor A_d/m ist schon von der Ordnung $1/n$. Die skalentheoretisch nahegelegte Form von $r_{\perp}$ kann geschrieben werden als

$$r_{\perp} = g^{\chi/\varphi} \left[1 + \left(r/g^{\chi/\varphi} \right)^{(1-\dot{\alpha})/\dot{\chi}} - \frac{A_d}{m} \left(r/g^{\chi/\varphi} \right)^{1/\dot{\chi}} \right] + O(1/n^2) \quad (38)$$

wobei wir ausnahmsweise die später aus unseren Rechnungen abzulesenden $1/n$ -Entwicklungen der Exponenten $\chi, \dot{\chi}, \varphi$ und $\dot{\alpha}$ vorwegnehmen:

$$\chi = \chi_0 + \chi_1/n \quad : \quad \chi_0 = 1/(1-\epsilon/2) \quad , \quad \chi_1 = 12 S_d/(\epsilon-2) ; \quad \dot{\chi} = \dot{\chi}(m) \quad (39)$$

$$\varphi = \chi_0 + \frac{4}{3} \chi_1/n \quad \text{sowie} \quad \dot{\alpha} = -\epsilon/(2-\epsilon) + 8(3-\epsilon)S_d/(2-\epsilon)m$$

(setzt man nur χ als bekannt voraus, so kann φ auch aus $r_{\perp}|_{r_0} \propto g^{\dot{\chi}/\varphi}$ und Gl. (38) bestimmt werden).

Man kann bereits mit r als Temperaturmaß die wesentlichen Eigenschaften der senkrechten Suszeptibilität diskutieren:

Fall a: $\dot{\alpha} > 0$, d.h. die spezifische Wärme divergiert bei $T_c(g)$.

In diesem Fall, der in $O(1/n)$ und bei $d=3$ für $m \leq 3$ realisiert ist (exp. allerdings schon für $m \leq 2$), ist der in $\dot{t}$ lineare Term gegen den $\dot{t}^{1-\dot{\alpha}}$ -Teil von $r_{\perp}$ vernachlässigbar. Damit findet man, daß für $\dot{t} \rightarrow 0$ $\frac{\partial \chi}{\partial T}$ proportional zur spezifischen Wärme ist.

Dies gilt auch für das sphärische Modell, obwohl $\dot{\alpha} = -\epsilon/(2-\epsilon)$ negativ ist, denn der dritte Term in (35) verschwindet für $m \rightarrow \infty$.

Fall b: $\alpha = 0$, Spez. Wärme logarithmisch *singulär* oder Spitze, wird hier nicht diskutiert.

Fall c: $\alpha < 0$, d.h. die spezifische Wärme bleibt endlich mit einer Spitze bei $T_c(g)$, und zwar für $m \geq 3$. Dann gilt nur noch die abgeschwächte Behauptung¹³³: die 'singulären Teile' der senkrechten Suszeptibilität und der Entropie, die beide aus dem $t^{2-\alpha}$ -Anteil der freien Enthalpie abgeleitet werden, sind bei konstantem g zueinander proportional. Das ist in Übereinstimmung mit Fisher's skalentheoretischen Überlegungen, Wegner's Rechnungen zum SM sowie mit Suzuki's $1/n$ -Entwicklung für konstantes g . Für $t \rightarrow 0$ und jedes endliche n mit $\alpha < 0$, ist aber die führende T -Abhängigkeit von $r_\perp$ durch den linearen Term in t gegeben. Zudem hat dieser Ausdruck ein negatives Vorzeichen, so daß noch tief im kritischen Bereich der crossover von t - zu $t^{1-\alpha}$ -Verhalten für steigende Temperatur über ein Maximum der senkrechten Suszeptibilität zustandekommt. Die entsprechende Temperatur $T_{\max}$ ist offenbar größer als $T_c(g)$ und sie kann für $d=3$ durch

$$\tau(T_{\max}) \cong \left((1 + m^2/n^2) / (m\pi^2 - 4) \right)^{2m\pi^2 / (m\pi^2 - 8)} g \quad (40)$$

dargestellt werden. Diese Approximation gilt nur für großes m (für kleines m geht $r(T_{\max})$ in dieser Formel nicht gegen null), denn wir haben im dritten Term von (38) nur den sphärischen-Limes-Exponenten verwendet.

Obwohl wir stets $(u_o - u_{oc})$ -Beiträge weglassen und trotzdem nicht-führende Terme in den Gln. (35) bis (38) mitgenommen haben, ist dies korrekt, denn wegen der Divergenz der Blasendiagramme fiel u_o bereits aus der Gleichung (30) heraus.

Das Zwischenresultat $r_\perp = r_\perp(r, g)$ verwenden wir nun, um die t und g -Abhängigkeit der Suszeptibilität bzw. der Skalenfunktionen zu ermitteln:

$r, r_\perp$ sowie $X, X_\perp$ als Funktionen von t und g

Durch Einsetzen von (35) in (28) finden wir alle $O(1/n)$ -Terme, die man für $t = t(r, g)$ mit $t = T - T_c(0)$ benötigt. Es zeigt sich, daß die führenden $O(1/n)$ -Terme in (28) durch die mit einer "bubble-Kette" renormierten geschlossenen Schleife erzeugt werden.

Mit Hilfe der Relation

$$J(r, p^2) \equiv \int_g (q^2 + r)^{-2} \left[\frac{1}{(p+q)^2 + r} - \frac{1}{p^2 + r} \right] = -\frac{1}{2} \frac{\partial \pi(r, p^2)}{\partial r} - \frac{1}{p^2 + r} \int_g (q^2 + r)^{-2} \quad (41)$$

ist die renormierte Schleife gegeben durch

$$L(r, g) = \frac{k_d u_0}{6} \left\{ \frac{1}{m} \int_{\epsilon'g}^{\epsilon'g} dp^2 p^{2-\epsilon} \pi^{-1}(r, p^2) (m J(r, p^2) + (n-m) J(r+g, p^2)) + \right. \\ \left. + \int_{\epsilon'g}^{\Lambda^2} dp^2 p^{2-\epsilon} [m \pi(r, p^2) + (n-m) \pi(r+g, p^2)]^{-1} (m J(r, p^2) + (n-m) J(r+g, p^2)) \right\} \quad (42)$$

Durch Einsetzen der Entwicklung (34) für die Blasen π kann man

$L(r, g)$ auswerten und man findet

$$L(r, g) - L(0, 0) = u_0 J S_d \left[r^{1-\epsilon/2} \ln r + \frac{n-m}{n} (g^{1-\epsilon/2} - r^{1-\epsilon/2}) \ln g \right] \quad (43)$$

wobei $J = \pi(0, 1) \Gamma(2-\epsilon) / \Gamma^2(1-\epsilon/2)$

Damit ergeben die Gln. (13), (28) und (43)

$$t = m u_0 c r^{1-\epsilon/2} \left[1 + 3 D(\epsilon) \left(\frac{1}{m} \ln r + \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{m} \right) \ln g \right) \right] \\ + (n-m) u_0 c g^{1-\epsilon/2} \left[1 + 4 D(\epsilon)/m \ln g \right] \quad (44)$$

wobei $D(\epsilon) = 4 J S_d \sin(\pi\epsilon/2) / (k_d \pi) = 2 S_d (1-\epsilon/2)$

und $c = k_d \pi / (12 \sin(\pi\epsilon/2))$

Die Potenzierung der Logarithmen in Gl. (44) ist eindeutig und ergibt

$$t = u_0 c \left\{ m r^{1-\epsilon/2 + 3D(\epsilon)/m} g^{3(\frac{1}{n} - \frac{1}{m})D(\epsilon)} + (n-m) g^{1-\epsilon/2 + 4D(\epsilon)/n} \right\} \quad (45)$$

Die Identifikation dieser Ausdrücke mit denen der Skalentheorie wird erleichtert durch die Diskussion der folgenden Spezialfälle:

Entlang der kritischen Linie, die durch $r=0$ lokalisiert ist, erwarten wir $t = t_c(g) = T_c(g) - T_c(0) \propto g^{1/\psi}$ mit $\psi = \varphi$, wobei ψ und φ den shift- und den crossover-Exponenten bezeichnen. Aus Gl. (45) folgt¹⁹

$$t_c(g) \equiv T_c(g) - T_c(0) = (n-m) u_0 c g^{1-\epsilon/2 + 4D(\epsilon)/n} \quad (46)$$

so daß gilt

$$1/\varphi = 1/\psi = 1-\epsilon/2 + 4D(\epsilon)/n \quad (47)$$

Für konstante Anisotropie g erwarten wir entlang einer Linie C in

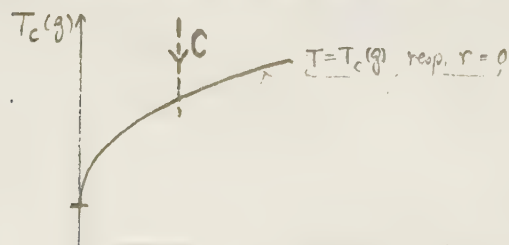


Fig. 11

Fig. 11 das Skalenverhalten am m-Vektor kritischen Punkt

$$\dot{t} \propto r^{1/\dot{\gamma}} \quad (48)$$

Da der letzte Term in (45) gerade die Verschiebung der kritischen Temperatur angibt, kann man diesen mit t zu $\dot{t}$ zusammenfassen, denn es gilt $t = \dot{t} - t_c(g)$. Man kann also schreiben

$$\dot{t} = m u_0 c r^{1 - \epsilon/2 + 3 D(\epsilon)/m} g^{3(\frac{1}{n} - \frac{1}{m}) D(\epsilon)} \quad (49)$$

wobei der resultierende Wert $\dot{\gamma}^{-1} = 1 - \epsilon/2 + 3D(\epsilon)/m$ in Übereinstimmung ist mit dem in Gl. (39) angegebenen. Es ist also klar, daß die Skalenform von (45) gegeben ist durch

$$\dot{t} = u_0 c \left\{ m r^{1/\dot{\gamma}} g^{(\dot{\gamma} - \gamma)/(\dot{\gamma}\varphi)} + (n-m) g^{1/\varphi} \right\} \quad (50)$$

Wie bereits in der Skalentheorie diskutiert (Riedel und Wegner, PJF), kann man die Suszeptibilität als Funktion von g und $\dot{t}$ in der Form

$$\chi(g, \dot{t}) \cong \dot{A}(g) \dot{t}^{-\dot{\gamma}} \quad (51)$$

mit $\dot{A}(g) = A_\infty g^{(\dot{\gamma} - \gamma)/\varphi}$

ausdrücken. Dabei heißt $\dot{A}(g)$ kritische Amplitude, denn diese Größe divergiert wegen $\dot{\gamma} < \gamma$ bei endlichen n für $g \rightarrow 0$. Offenbar ist (49) von derselben Struktur wie (51) und wir erhalten in $O(1/n)$ aus (49)

$$\chi(g, \dot{t}) = (m u_0 c)^{\dot{\gamma}} g^{(\dot{\gamma} - \gamma)/\varphi} \dot{t}^{-\dot{\gamma}} \quad (52)$$

wobei die Exponenten durch (39) gegeben sind. Da die Kopplungskonstante u_0 ungefähr durch den kritischen Wert $u_{0c} = \frac{6\epsilon\Lambda^\epsilon}{mK_d}$ bei $T_c(g \neq 0)$ gegeben ist, können wir die Konstante A_∞ alleine durch d , m und einen am jeweiligen System geeignet zu wählenden cutoff ausdrücken als

$$A_\infty \cong \left(\frac{\pi\epsilon/2}{\sin(\pi\epsilon/2)} \Lambda^\epsilon \right)^{\dot{\gamma}} \quad (53)$$

Mißt man nun die Temperatur von der kritischen Temperatur $T_c(0)$ des isotropen Punktes anstelle von $T_c(g)$ aus (was für Experimente günstiger ist), so muß man sich für die Suszeptibilität in Abhängigkeit von t und g interessieren. In der Nähe der kritischen

Linie $T_c (g \neq 0)$ ist das singuläre Verhalten bezüglich der Temperatur in der Skalenfunktion enthalten. Diese finden wir durch Einsetzen von $r^{-1} = A t^{-\delta} X(Bg/t^\varphi)$ in Gl. (50) und Auflösen nach $X(z)$, wobei wir der Kürze wegen $z = x^{1/\varphi} = (Bg)^{1/\varphi}/t$ anstelle von x als Skalenvariable verwenden. Wir erhalten

$$X(z) = \left(\frac{m}{n-m}\right)^\delta \left(\frac{n-m}{n}\right)^\delta z^{\delta-\delta} [1-z]^{-\delta} \quad (54)$$

und $A = (n u_{oc})^\delta$ sowie $B = ((n-m) u_{oc})^\varphi$.

Die Skalenfunktion $X_\perp$ für die senkrechten Komponenten erhält man durch Einsetzen von (54) in (37) als

$$X_\perp(z) = \left(\frac{n-m}{n}\right)^\delta z^{-\delta} \left[1 + \left(\frac{n-m}{n}\right)^{1-\delta} \left(\frac{1}{2}-1\right)^{1-\delta} - \frac{A_d}{m} \frac{n-m}{n} \left(\frac{1}{2}-1\right) \right]^{-1} \quad (55)$$

mit $A_\perp = A$, weil wir die Normierung $X_\perp(0)=1$ gewählt hatten.

Wie in der Skalentheorie erwartet und durch die Hochtemperatur-Entwicklungen von PJF bestätigt, zeigen die Skalenfunktionen X und $X_\perp$ universelles kritisches Verhalten (für $z \rightarrow 1$) und insbesondere dabei die gleiche Struktur wie Gl. (24). Die Koeffizienten A und $A_\perp$ sowie der Skalenfaktor B sind dagegen nichtuniversell, was man an ihrer cutoff-Abhängigkeit mittels u_{oc} erkennen kann.

Obwohl unsere Resultate in $O(1/n)$ nur für große m und n eine gute Approximation darstellen werden, ist ein Vergleich der Skalenfunktionen in $O(1/n)$ bzw. in der HTE von PJF speziell für den Fall $m=2, n=3$ noch sinnvoll:

erstens entspricht der Koeffizient $X_z=1$ (nach PJF's Gl. (7.10), Fall ii) genau dem Faktor $\left(\frac{m}{n-m}\right)^\delta \left(\frac{n-m}{n}\right)^\delta = 2^{1-\delta} 3^{-\delta} \lesssim 2/3$ von Gl. (54). Abgesehen vom numerischen Vergleich zeigt sich hier ein Vorteil der feldtheoretischen Methode, denn man kann folgende Struktur des Vorfaktors ablesen: die Größe des Vorfaktors ist proportional zum Verhältnis aus der Anzahl der leichten zu der der schweren Komponenten was mit dem reduzierten Exponenten δ verknüpft ist, und dem Quotient aus den schweren- und allen Komponenten, was mit dem Einfluß des isotropen Fixpunkts mittels δ zusammenhängt.

Zum Zweiten ist die funktionale Abhängigkeit der Skalenfunktionen aus demselben Grund wie im sphärischen Limes auch in $O(1/n)$ in Übereinstimmung mit der Hochtemperaturentwicklung.

Der physikalisch relevante Teil des in $O(1/n)$ geschilderten reichhaltigen mathematischen Bildes ist relativ klein und sollte in erster Linie mit Resultaten der ϵ -Entwicklung verglichen werden. Berechnungen der Skalenfunktion existieren in der ϵ -Entwicklung aber noch nicht und die Berechnung des crossover- bzw. shift-Exponenten durch Bruce¹³⁴ deutet auf ernste Schwierigkeiten dieses Verfahrens hin. Das dabei auftretende Problem ist die Fixierung von u_0 im crossover-Bereich, wo m-Vektor- und n-Vektor-Verhalten miteinander konkurrieren und bei $g=0$ zu einem Sprung in u_0 wie in den kritischen Exponenten führen. Dagegen ist φ bei $g=0$ definiert, weshalb Bruce den isotropen Wert von u_0 gewählt hat, um irrelevante Korrekturen aus u_0 zu eliminieren. Man beachte, daß g als kleine Störung am isotropen Punkt und nicht als Fixpunkt-Wert g^* zu verstehen ist. Das Resultat ist durch die Rechnung von Wilson entlang der isotropen Achse und die Konsistenz-Forderung mit der $1/n$ -Entwicklung abgesichert¹².

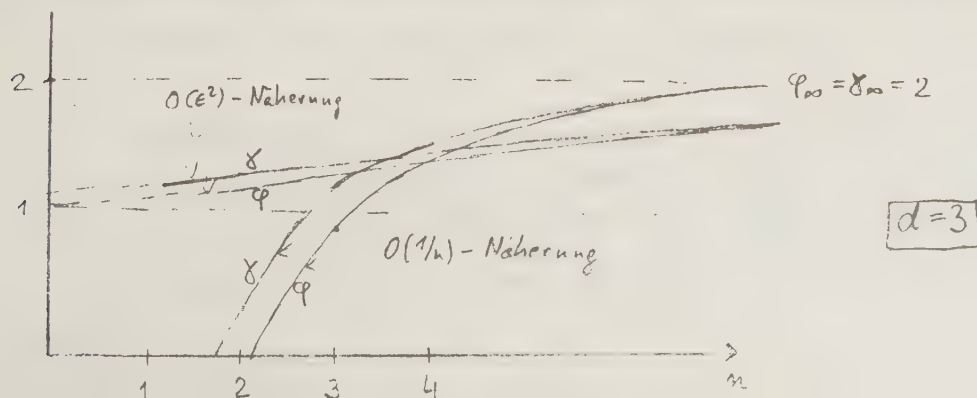
In Bezug auf SrTiO_3 ist der numerische Vergleich zwischen dem $O(1/n)$ - und dem $O(\epsilon^2)$ -Resultat von φ besonders interessant, denn φ bzw. ψ läßt sich gemäß Modell (3) direkt messen, wenn man den anisotropen Druck gegen null gehen läßt. Wir werden dabei diskutieren, daß erste experimentelle Hinweise auf $\varphi < 1$ hindeuten, was ausgehend von Modell (3) theoretisch nicht erklärt werden kann. Die Resultate für φ sind

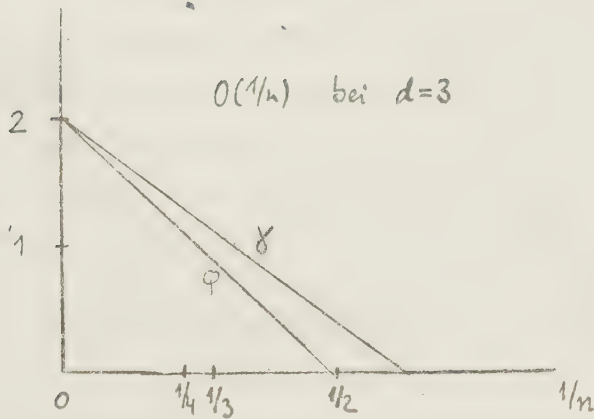
$$\varphi(n, d) = 1 + \frac{n}{2(n+8)} \epsilon + \frac{n(n^2+24n+68)}{4(n+8)^3} \epsilon^2 + O(\epsilon^3) : \varphi(3,3) \cong 1.22$$

$$\varphi(n, d) = \frac{2}{2-\epsilon} - \frac{8}{n} \frac{\sin(\pi\epsilon/2)}{\pi} \frac{\Gamma(2-\epsilon)}{\Gamma^2(2-\epsilon/2)} : \varphi(3,3) \cong 0.9 \quad (56)$$

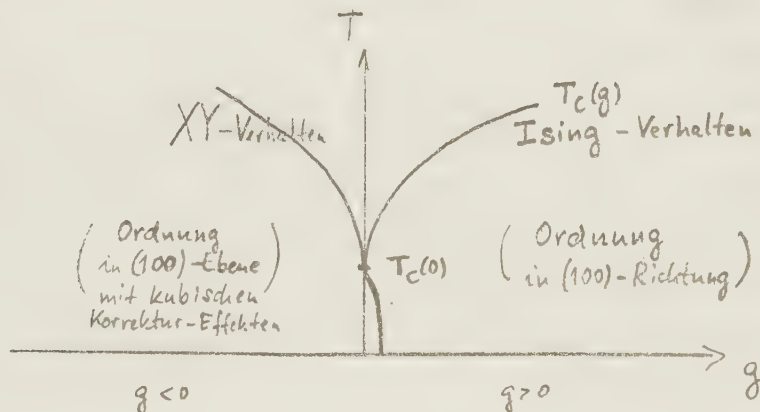
$$\varphi_{\text{HTE}}(3,3) \cong 1.25$$

Trägt man außer φ noch γ für beliebige n bei $d=3$ auf, so zeigt sich, daß der Zusammenbruch der $1/n$ -Entwicklung bei kleinen n der Grund dafür ist, daß φ in $O(1/n)$ kleiner als eins ist und es darf als sicher gelten, daß dies in $O(1/n)$ nicht mehr der Fall ist. Das nachfolgende Diagramm bestätigt damit die Ungleichung $1 < \varphi < \gamma$





Für das Phasendiagramm (T - g -Diagramm) des SrTiO_3 -Modells bedeutet das Resultat $\varphi > 1$, daß die Tangente an die kritische Linie im isotropen kritischen Punkt senkrecht steht, während sie bei $\varphi < 1$ horizontal wäre



Eingezeichnet ist im obigen Phasendiagramm auch die Koexistenzkurve einer Ordnung in der (100)-Richtung, was dem Ising-Verhalten auf der kritischen Linie bei (positivem) Druck entspricht, weil $m=1$ für g positiv¹³⁵, mit der Ordnung entlang der (100)-Ebene für negativen Druck, ie Zug mit $g < 0$. Kubische Korrekturen im nicht-asymptotischen kritischen Bereich ergeben Abweichungen der Koexistenzkurve oder auch Spin-Flop-Linie von der Vertikalen und ebenso werden im XY-Bereich unterhalb T_c die Kubenachsen in der (100)-Ebene bei der Ordnung bevorzugt (siehe auch Aharony, Bruce¹²⁷). Die transversalen Fluktuationen in dieser Ebene um die Kubenachsen werden dann umso größer, je näher man an der kritischen Temperaturlinie ist.

Der Phasenübergang an der Koexistenzkurve ist von 1.Ordnung und erfordert ebenso wie das crossover-Verhalten eine detailliertere Untersuchung. So sollte in Bezug auf φ bzw. ψ der Effekt von Druckschwankungen, Verunreinigungen, Oberflächen (welche zu einem PÜ 1.

Ordnung führen können) etc. untersucht werden. Gegenüber dieser noch unbefriedigenden Situation dürfen die ohne äußeren Druck von Müller und Berlinger an LaAlO_3 wie an SrTiO_3 durchgeführten Messungen, die beide Ising-Exponenten (s.Kap.I) ergaben, als theoretisch verstanden gelten. Nach Müller und Thomas (s. auch Aharony-Bruce) ist die erzeugte Monodomänenstruktur unterhalb T_c einer durch positiven Druck erzeugten Verzerrung äquivalent und damit für den Ising-Wert $\beta=0.33\pm0.02$ verantwortlich.

Abschließend sei darauf verwiesen, daß es speziell für stark kubisch anisotrope Systeme wie SrTiO_3 lohnend sein könnte, die irrelevanten kubischen Korrekturen zum scaling samt Amplituden zu berechnen. Wir vermuten, daß wegen der schwachen Irrelevanz kubischer Störungen bei $n=3$ und des großen Vorfaktors der kubischen Beiträge ein großer Teil des beidseitig 10^0K breiten kritischen Bereiches kubisch dominiert ist.

Einfachere Fälle mit relevant kubischem Verhalten, dh direkt bei T_c , und die Grenzlinie zwischen isotropem und kubischen Bereich untersuchen wir im Folgenden.

2. Die Relevanz kubischer ϕ^4 -Störungen

a. - bei kurzreichweitiger Wechselwirkung

Wir werden uns auch hier vor allem für axial anisotrope Systeme interessieren und deshalb nur eine kurze Diskussion der Modelle geben, bei denen alle Komponenten äquivalent sind. Bei letzteren Modellen sind insbesondere die Arbeiten von Wallace¹¹⁹ und Aharony⁹⁹ von Bedeutung. Prinzipiell sind für den einen Hamiltonian

$$\beta H = \frac{1}{2} \int_x \sum_{\alpha=1}^n \left(r_0 S_{\alpha}^2(x) + (v S_{\alpha}(x))^2 \right) + \frac{u_0}{4!} \int_x \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \right)^2 - \frac{\Delta}{4} \int_x \sum_{\alpha} S_{\alpha}^4(x) \quad (1)$$

zwei Fälle zu unterscheiden, nämlich ob die Energieminima bei $\Delta < 0$ entlang der Kubendiagonalen oder bei $\Delta > 0$ entlang der Kubenachsen liegen. Im ersten Fall hat Aharony eine RG-Version mit großem cut-off b verwendet und damit folgende Fixpunkte gefunden

$$\begin{array}{l|l} \text{Gauß: } u_G^* = \Delta_G^* = 0 & \text{Ising: } u_I^* = 0, \Delta_I^* = -\frac{\epsilon}{36K_d} \left(1 + \frac{12}{27}\epsilon \right) \\ \text{Heisenberg: } \Delta_H^* = 0, u_H^* = \frac{\epsilon}{4K_d(n+8)} \left(1 + \frac{9n+42}{(n+8)^2}\epsilon \right) & \text{kubisch: } \begin{aligned} u_C^* &= \frac{\epsilon}{12K_d n} \left(1 + \frac{(n-1)(406-19n)}{27n^2}\epsilon \right) \\ \Delta_C^* &= -\frac{\epsilon}{12K_d n} \left(\frac{n-4}{3} + \frac{(n-1)(17n^2+110n-424)}{81n^2}\epsilon \right) \end{aligned} \end{array} \quad (2)$$

von denen der isotrope für $n \leq 3$ und der kubische Fixpunkt für $n \geq 4$ stabil ist. Die kubischen kritischen Exponenten weichen nur wenig von denen des isotropen Modelles ab, solange der isotrope- und der kubische Wechselwirkungsteil annähernd gleich stark relevant sind, also in der Gegend von $n=3$ bis 4. Für $n=1$ sind die kubischen und die Gaußschen Exponenten gleich, während bei $n=2$ sogar der kubische mit dem Ising-Fixpunkt übereinstimmt. Wir verstehen jetzt den Zusammenhang mit unserem 2-komponentigen Modell in II.4.a bei $g=0$ so, daß die kubische Symmetrie nur bei $n=2$ alle Komponenten entkoppelt und somit auf das kritische Verhalten des Ising-Modells führen würde, wenn dieser Fixpunkt stabil wäre. Ein delikater Aspekt des kubischen Fixpunkts ist, daß im Gegensatz zur obigen

ϵ -Entwicklung bei der $1/n$ -Entwicklung um diesen Fixpunkt $\Delta^* < 0$ nicht mehr als kleiner Parameter benutzt werden kann, denn nach (2) ist $\Delta=O(n^0)$, während $u_0=O(1/n)$. Die gleiche Abschätzung der Größenordnungen erhält man auch aus der Energiefunktion, wobei die Ordnung entlang der Kubendiagonalen entscheidend ist. Es ist erleuchtend, beide Fälle, Δ negativ und positiv, direkt zu vergleichen: bei festgehaltener Länge $|s|=M$ ergeben sich minimale Energien, wenn:

A: $S_1 = S_2 = \dots = S_n = M/\sqrt{n}$ in Kubendiagonale, wenn $\Delta < 0$

B: $S_i = M$ für ein i , alle anderen $S_j = 0$ in Kubenachse, wenn $\Delta > 0$

Abschätzung an der Energiedichte:

(3)

A: $\sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^2 = M^2$, $(\sum S_{\alpha}^2)^2 = M^4$, $\sum S_{\alpha}^4 = M^4/n$

mit $M^2 = O(n)$ folgt: $u_0 = O(1/n)$, $\Delta = O(1)$

B: $\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2 = M^2$, $(\sum S_{\alpha}^2)^2 = \sum S_{\alpha}^4 = M^4$

$\Rightarrow u_0 = O(1/n)$ und $\Delta = O(1/n)$

Während der Fall A kubisches kritisches Verhalten 2. Ordnung zeigt, wobei die $1/n$ -Entwicklung um das (nicht exakt lösbare) Ising-Modell und nicht um das Gauß-Modell ausgeführt werden muß, hat Wallace im Fall B einen Phasenübergang 1. Ordnung nachgewiesen, der in der MFA nicht auftritt. Wir untersuchen bei zusätzlicher axialer Anisotropie den Fall A in III.2.c und den Fall B in III.3.a. Obwohl beide Fälle so grundsätzlich verschieden sind, kann man die Relevanz der kubischen Störung in der Nähe des isotropen Fixpunkts simultan für beide Fälle studieren, da man Δ als Entwicklungsparameter zusätzlich zu $1/n$ oder ϵ auffassen darf. Ketley und Wallace¹²³ haben dieses Verfahren benutzt, indem sie die Konkurrenz des kubischen Anteil $u_2 \propto \Delta r^{\alpha_2}$ mit dem isotropen Anteil $u_1 \propto u_0 r^{\alpha_1}$ des 4-Punkt-Vertex Γ_4 , der definiert ist durch

$$\Gamma_4^{(ijkl)}(0) = \int_{x,y,z} \langle S_i(x) S_j(y) S_k(z) S_l(0) \rangle_{\text{con}} / \left(\int_x \langle S_i(x) S_i(0) \rangle \right)^4 \quad (4)$$

Für $n=3$ fanden Ketley und Wallace das bemerkenswerte Ergebnis

$$\alpha_2 - \alpha_1 = 0.045\epsilon - 0.089\epsilon^2 + 0.139\epsilon^3 + O(\epsilon^4), \quad (5)$$

was auf einen asymptotischen Charakter der ϵ -Entwicklung hindeutet. Wenn $\alpha_1 > \alpha_2$, so ist das Verhalten asymptotisch kubisch, und zwar unabhängig von Δ/u_0 , während es für $\alpha_2 > \alpha_1$ effektiv isotrop ist. Daher ergibt sich für $n=d=3$ kubische Irrelevanz in $O(\epsilon)$ und $O(\epsilon^3)$ gegenüber kubischer Relevanz in $O(\epsilon^2)$. Während die $O(1/n)$ -Näherung den isotropen Bereich überschätzt und die Grenzlinie bei $\bar{n}(d=3)=5.3$

lokalisiert, scheint das zuverlässigste Ergebnis $\bar{n}(3)=3.13$ zusein, was sich aus der auf der ϵ -Entwicklung (5) basierenden Padé-Approximation ergibt. Der Wert $\bar{n} > 3$ ist übrigens durch die Experimente an SrTiO_3 abgesichert, und zwar dadurch, daß trotz $\Delta > 0$ der Phasenübergang kontinuierlich ist.

Im folgenden Abschnitt untersuchen wir die Relevanz kubischer Störungen unter der speziellen Situation besonders langreichweitiger Wechselwirkungen, und zwar insbesondere im Hinblick auf $d=2$ -Systeme, die bei kurzreichweitigen Wechselwirkungen mit der ϵ - und der $1/n$ -Entwicklung nicht untersucht werden können.

b. Relevanz kubischer φ^4 -Wechselwirkungen bei Systemen mit langreichweitigem Potential

Der Einfluß langreichweitiger Kräfte, z.B. Coulomb-Kräfte in geladenen Systemen, auf das kritische Verhalten ist theoretisch und experimentell bekannt. Es seien ohne a priori-Festlegung der Symmetrie des Hamiltonians vier verschiedene Erscheinungsformen langreichweitiger Wechselwirkungen erwähnt: 1. Potential, die mit dem Abstand wie $x^{-d-\sigma}$ verschwinden, wobei σ long-range Parameter heißt; die Wechselwirkung heißt langreichweitig (LRW), wenn $\sigma < 2$, und kurzreichweitig, wenn $\sigma \geq 2$. 2. Dipol-Dipol-Wechselwirkungen, die zu neuem kritischem Verhalten mit eigener charakteristischer Symmetrie führen (die Werte der kritischen Exponenten liegen näher an denen des Molekularfeld-Modells als die der isotropen n-Vektor Modelle).

Die Kopplung von Spindimension an die Ortsraum-Dimension ist wegen der Relevanz der Dipolwechselwirkung von größerer Tragweite als beim SrTiO_3 ^{136,137}; 3. bei endlichen Kristallen mit freier Oberfläche und elastischer Gitterkopplung erzeugt die Oberfläche langreichweitige W_w , die ihrerseits zu einem diskontinuierlichen Phasenübergang führen, der jedoch wegen der Kleinheit des Ordnungsparameter-Sprungs noch nie beobachtet wurde¹³⁸; 4. bei Magneten und Pseudomagneten (NH_4Cl mit order-disorder Übergang) mit Gitterkopplung wird auch ohne Oberfläche eine indirekte langreichweitige W_w induziert, die zu trikritischem Verhalten führen kann. Dies wird in Abschnitt III.4 untersucht.

Diese kurze Einleitung mag zusammen mit der Tabelle der kritischen Exponenten für die Fälle 1 und 2 genügen, um unsere Frage nach der Relevanz kubischer Störungen im Fall 1 einzugliedern und zu motivieren:

Es ist für die prinzipielle Bestätigung der Wilson-Theorie wichtig, Bedingungen zu finden, unter denen kubische φ^4 -Wechselwirkungen relevant sind, wodurch man evtl. die Existenz kubischen Fixpunkt-Verhaltens experimentell nachweisen könnte. Die schwache Irrelevanz kubischer Störungen bei $n=3$, $\sigma=2$ und $d=3$ läßt die Hoffnung zu, daß unter geeigneter Wahl eines relevanten Parameters diese Störungen auch in einem physikalischen (n,d) -Bereich relevant

sein könnten. Obwohl wir von der langreichweitigen W_w keine Begünstigung des Verhaltens mit niedriger, also kubischer Symmetrie erwarten, sind besonders noch im Ortsraum 2- bzw. 1-dimensionale mehrkomponentige Systeme von Interesse. Hier muß hervorgehoben werden, daß bei SRW die $(d=1)$ -Systeme überhaupt keinen Phasenübergang zeigen, während bei $d=2$ und $n=3$ keine zuverlässige theoretische Information existiert, außer daß es für $n=2$ keine spontane Magnetisierung gibt. Bekanntlich können LRW aber selbst in $(d=1)$ -Systemen scharfe Phasenübergänge erzeugen, wenn σ nur klein genug ist. Wir hoffen außerdem, daß die folgenden Rechnungen durch Extrapolation $\sigma \rightarrow 2$ auch etwas Licht auf die $(d=2)$ -XY- und $(d=2)$ -Heisenberg-Modelle mit SRW werfen.

Im Falle von SRW wurde das genaueste Ergebnis für die kritische Anzahl von Feldkomponenten $\bar{n}(d)$, die den Bereich mit isotropem Verhalten von dem mit kubischem Verhalten trennt (die Störungen sind bei $\bar{n}(d)$ gerade marginal), numerisch mit Hilfe der Renormierungsgruppe gewonnen^{127,139}: $\bar{n}(3)=3.13$. Die direkte ϵ -Entwicklung von $\bar{n}(d)$ bis 0 (ϵ^3) hat allerdings bedenklich asymptotischen Charakter und läßt bestenfalls nur die Abschätzung $2 < \bar{n}(d) < 4$ für $3 \leq d < 4$ zu. Das $O(1/n)$ -Resultat $\bar{n}(3)=5.3$ stellt durch Vergleich mit der ϵ -Entwicklung eine obere Schranke für $\bar{n}$ dar, kann aber nicht als numerisch befriedigend angesehen werden. Wir benutzen die $1/n$ -Entwicklung in diesem Sinne und berechnen insbesondere die σ -Abhängigkeit von $\bar{n}(d, \sigma)$ für den Fall eines Potentials $V(x) \propto x^{-d-\sigma}$ mit $0 < \sigma < 2$. Der hier interessierende Hamiltonian hat dann die Form

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H}_0 &= \frac{1}{2} \int d^d x \sum_{\alpha=1}^n \left[r_0 S_{\alpha}^2(x) + (v^{\sigma/2} S_{\alpha}(x))^2 \right] \\ \beta \mathcal{H}_1 &= \int d^d x \left[\frac{u_0}{4!} \left(\sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^2(x) \right)^2 - \frac{\Delta}{4} \sum_{\alpha=1}^n S_{\alpha}^4(x) \right] \end{aligned} \quad (1)$$

wobei $r_0 \propto T - T_{CO}$. Für die Untersuchung der Relevanz der kubischen Störung genügt es Δ als klein gegen u_0 anzunehmen, so daß wir um den isotropen Fixpunkt entwickeln dürfen und nicht nach Vorzeichen von Δ unterscheiden müssen. Letzteres ist erst dann wichtig, wenn bei irrelevanter Δ -Störung die Ordnung unterhalb T_C oder bei relevanter Δ -Störung das dominierende kubische Verhalten untersucht

werden soll. Wie die RG-Analyse gezeigt hat, kann die Annahme $\Delta \ll u_0$ im kubischen Bereich nur für positives Δ durch $\Delta = O(1/n)$ realisiert werden, jedoch nicht für negatives Δ , weil dann $\Delta = O(1)$.

Die folgenden Resultate für das LR-scaling¹⁴⁰ sind in einem eingeschränkten nichtklassischen LR-Bereich gültig. Falls $\sigma < 2$ wird der nichtklassische LR-Bereich durch $\sigma < d/2$ gegen den MF-Bereich für Wechselwirkungen mit noch längerer Reichweite ($\sigma < d/2$) abgegrenzt. Phasenübergänge existieren aber nur unter der Bedingung $\sigma < d$ resp. $d > 2$ für $\sigma \geq 2$ bei vielkomponentigen Systemen mit $n \geq 4$, während für $d=2$ das Ising-, XY- und das Heisenberg-Modell endliche Übergangstemperaturen besitzen. Nach einer RG-Arbeit von Sak¹⁴¹ ist der nichtklassische LR-Bereich mit $d/2 < \sigma < d$ gegenüber dem SR-Bereich durch $\sigma < 2 - \eta_{sr}$ über die Annahme $\sigma < 2$ hinaus beschränkt. Man kann $\sigma < 2 - \eta_{sr}$ auch durch $\eta_{lr} > \eta_{sr}$ ausdrücken. Sak hat gezeigt, daß (zumindest bis $O(\epsilon)$), solange der LR-Wert $\eta_{lr} = 2 - \sigma$ kleiner ist wie der SR-Wert η_{sr} , eine widerspruchsfreie Renormierung der Wellenfunktion nur innerhalb des SR-Skalenverhalten möglich ist. Daher treten in diesem Bereich noch die SR-Exponenten auf, was den erfreulichen Effekt eines kontinuierlichen Übergangs von LR- auf SR-Exponenten bei $\eta_{lr} = \eta_{sr}$ hat, während der ursprünglich bei $\sigma=2$ angenommene Übergang eine in mehreren Arbeiten diskutierte Unstetigkeit zur Folge gehabt hätte. Abschließend sei in dieser einleitenden Diskussion bemerkt, daß wegen $\lim_{d \rightarrow 2^+} \eta_{sr} = 0 + O(n^{-2})$ die einschränkende Bedingung von Sak mit $\sigma < 2$ in $O(1/n)$ für $d \rightarrow 2^+$ übereinstimmt.

Wir wenden zuerst die Methode von Ketley und Wallace¹²³ an, um die Konkurrenz des isotropen Wu und des kubischen 'scalings' an der verbundenen Vierpunkt-Funktion u_{ijkl} , die stellvertretend für andere Größen steht, zu studieren. Diese Funktion ist durch die folgende Zerlegung, die der Symmetrie des Hamiltonians angepaßt ist, gegeben

$$u_{ijkl} = u_1 (\delta_{ij} \delta_{kl} + \text{perm}) + u_2 \delta_{ijkl} \quad (2)$$

wobei $\delta_{ijkl} = 1$ falls $i=j=k=l$ und null sonst.

Wir definieren weiterhin das kritische ($r \rightarrow 0$)-Potenzverhalten der 'kubischen Funktion'

$$u_2 \propto \Delta r^{\alpha_2} + O(\Delta^2) \quad (3)$$

sowie der 'isotropen Funktion'

$$u_1 \propto u_0 r^{\alpha_1} + O(\Delta) \quad (4)$$

und bezeichnen α_2 und α_1 als kritische Exponenten.

Dann wird für $\alpha_1 < \alpha_2$ die Funktion u_2 gegen u_1 vernachlässigbar und damit der isotrope kritische Punkt stabil, während für $\alpha_1 > \alpha_2$ das kubische Verhalten relevant wird. Diese Schlüsse sind unabhängig von dem Größenverhältnis der Amplituden Δ und u_0 , jedoch ist die Breite des kritischen Bereichs, in dem man das führende Potenzverhalten erkennen kann, umso größer je größer die entsprechende Amplitude ist.

Führt man die Definition $\epsilon = 2\sigma - d$ ein und benutzt $\eta = 2 - \sigma$, dann folgt aus der Polyakov'schen Dimensionsanalyse mittels

$$\text{Diagram} \propto \text{Diagram} : \Gamma_4 \propto g^{-2} p^{-d} \propto r^{2 - \frac{d}{2-\eta}} = r^{\epsilon/\sigma} + \begin{cases} O(\epsilon^2) \\ O(1/n) \end{cases} \quad (5)$$

bereits

$$\alpha_1 = \epsilon/\sigma + \begin{cases} O(\epsilon^2) \\ O(1/n) \end{cases} \quad (6)$$

Es verbleibt die Berechnung des renormierten Δ -Vertex:

$O(1/n)$: Die führende Renormierung in dieser Ordnung ist durch die bekannte Kette von Blasen, die zwei auslaufende Propagatoren verbindet, gegeben:

$$u_2/6 = \text{Diagram} - 12 \text{Diagram} \quad (7)$$

Bei der Auswertung müssen wir lediglich beachten, daß die Propagatoren jetzt durch

$$G(r, q) = (q^{\sigma} + r)^{-1} \quad (8)$$

gegeben sind. Entsprechend ist das Resultat für eine Blase (Konst. und Berechnung s. Ref. 13)

$$\Pi(r, 1) = \Pi(0, 1) - \frac{2J_T}{\frac{d}{\sigma} - 1} r^{\frac{d}{\sigma} - 1} - I(-1, 0) r + \frac{2J_T}{\frac{d}{\sigma} - 1} r^{\frac{d}{\sigma}} + 2\tilde{J}_\sigma r^{\frac{d+2}{\sigma} - 1} + O(r^2) \quad (9)$$

Wir benutzen dies zusammen mit $(2\pi)^{-d} \int d^d p = \frac{K}{\sigma} \int dp^\sigma p^{d-\sigma}$ und erhalten

$$u_2 = 6\Delta \left[1 - 2u_0 (2\pi)^{-d} \int d^d p \left(1 + \frac{u_0}{6} \pi(r, p^\sigma) \right)^{-1} (p^\sigma + r)^{-2} \right]$$

$$= 6\Delta \left[1 + \frac{12}{n} \frac{K}{\sigma} \pi^{-1}(0,1) \ln r \right] \quad (10)$$

wobei $K \pi^{-1}(0,1) = 2 \Gamma(d-\sigma) \Gamma^2(\sigma/2) / (\Gamma(d/2) \Gamma^2(\frac{d-\sigma}{2}) \Gamma(\sigma - \frac{d}{2}))$

Durch Potenzierung erhalten wir den Exponent α_2 als

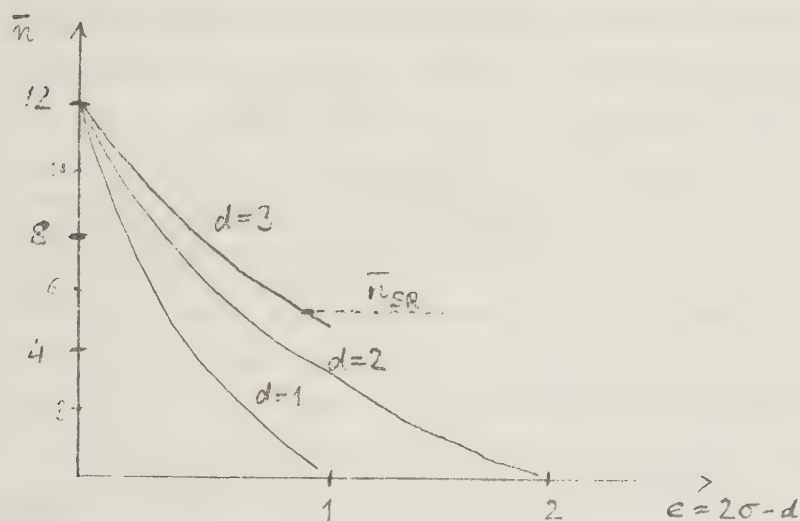
$$\alpha_2 = \frac{1}{n} \frac{24}{\sigma} \frac{\Gamma(d-\sigma) \Gamma^2(\sigma/2)}{\Gamma(d/2) \Gamma^2(\frac{d-\sigma}{2}) \Gamma(\sigma - \frac{d}{2})} \quad (11)$$

Es ist bemerkenswert, daß dieses Resultat bei $\sigma=2$ stetig in das SR-Ergebnis übergeht, so daß die 'irrelevante Unstetigkeit' von $\alpha_2 - \alpha_1$ bei $\sigma=2$ allein ein η -Effekt ist, in Übereinstimmung mit der Hypothese von Sak.⁴¹

Wir interessieren uns nun für die kritische Anzahl $\bar{n}(d, \sigma)$ von Feldkomponenten, die sich aus $\alpha_2(\bar{n}) - \alpha_1(\bar{n}) = 0$ bestimmt als

$$\bar{n}(d, \sigma) = - \frac{24}{d-2\sigma} \frac{\Gamma(d-\sigma) \Gamma^2(\sigma/2)}{\Gamma(d/2) \Gamma^2(\frac{d-\sigma}{2}) \Gamma(\sigma - \frac{d}{2})} \quad (12)$$

Das nachfolgende n - ϵ Diagramm illustriert dieses Ergebnis für die am meisten interessierenden diskreten Dimensionen $d=1, 2, 3$:



Wir haben in dieser Figur die Linien $\bar{n}(d, \sigma)$ bis zu kleinsten n durchgezogen, obwohl die $1/n$ -Entwicklung nur für größere n (mindestens $n \geq 2$) relevante Ergebnisse liefern kann. Wir wollen die

1/n-Entwicklung in $O(1/n)$ hier dazu benutzen, eine obere Schranke für $\bar{n}$ und damit für den isotropen Bereich zu finden, der durch $n < \bar{n}(d, \sigma)$ angegeben werden kann, während das kubische Verhalten bei $n > \bar{n}(d, \sigma)$ einschließlich dem sphärischen Modell auftritt. Somit schließt man aus obiger Skizze, daß Wechselwirkungen mit längerer Reichweite das isotrope Verhalten begünstigen. Für $d=3$ ist der kontinuierliche changeover vom LR- zum SR-Wert von $\bar{n}$ bei $2 - \sigma = \eta_{sr}$ eingezeichnet. Der wichtigste Schluß aber, den wir aus dem $O(1/n)$ -Resultat (12) hoffen ziehen zu können, betrifft die Existenz von σ -Bereichen, in denen ein- und zweidimensionale Systeme mit drei oder sogar nur zwei Feldkomponenten sich am kritischen Punkt kubisch verhalten sollten. Im Falle $d=2$ findet man zum Beispiel kubisches Verhalten für $n=3$ falls $\epsilon \gtrsim 0.9$ oder $\sigma \gtrsim 1.45$ und für $n=2$ falls $\epsilon \gtrsim 1.2$ oder $\sigma \gtrsim 1.6$. Im Falle $d=1$ ergeben sich entsprechende Werte bei $n=3$ und $n=2$, die in der obigen Skizze verwertet wurden¹³⁵. Der Erwartung, daß die kubischen Bereiche noch größer sind, sind durch die starke ϵ -Abhängigkeit der Exponenten für $1.5 \lesssim \epsilon \lesssim 2$ Grenzen gesetzt. In diesem Bereich nähert man sich dem Punkt, wo das sphärische Modell keinen Phasenübergang mehr hat, weshalb die 1/n-Entwicklung schlecht wird. Allein aus diesem Grund schon darf man die Linien in obiger Figur nur bis $n \approx 2$ herunterziehen. Inwieweit die Schlußfolgerungen aus dem $O(1/n)$ -Ergebnis zutreffen, kann durch Vergleich mit dem genauesten SR-Wert $\bar{n}(3)=3.13$ abgeschätzt werden: in $O(1/n)$ ist $\bar{n}(3)=5.3$; selbst wenn man den für $d=2, \sigma=3/2$ (ie $\epsilon=1$) gegenüber $d=3, \sigma=2$ (ie $\epsilon=1$) verkleinerten $\frac{1}{n}$ -Proportionalitätsfaktor in den Exponenten benutzt, wird $\bar{n}$ noch mit 3.8 gegen 3.13 überschätzt (entsprechend mit $d=1$ $d=3$: $4.37 \leftrightarrow 3.13$), so daß $\bar{n}$ aus der $O(1/n)$ -Rechnung mindestens bis $\epsilon=1$ den exakten Wert überschätzt (wir behaupten dies allerdings auch für $\epsilon \lesssim 1.2$). Zumindest für sehr kleine ϵ ist ein Vergleich mit der ϵ -Entwicklung angebracht. Dazu verwenden wir die Renormierungsgruppe in Aharony's Formulierung⁹⁹ mit einem großen cutoff b : für die hier wesentlichen Rekursionsformeln in u und $\Delta \leq 0$ brauchen wir nur die beiden folgenden Diagramme neu zu berechnen; bei der Integration benutzen wir Mellin-Transformationen und können so die Formeln für sein Modell⁹⁹ (man beachte $\Delta \rightarrow -\Delta$) auf $\sigma < 2$ erweitern:

$$\begin{aligned}
 \chi\chi &= K_d \int_{b^{-1}}^1 dq q^{d-1} \frac{1}{q^{2\sigma}} = K_d \int_{b^{-1}}^1 dq q^{-\epsilon-1} \\
 &= K_d \ln b \left(1 + \frac{\epsilon}{2} \ln b \right) + O(\epsilon^2)
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

$$\text{X} = \frac{K_{2\sigma}^2}{2} \left[\ln^2 b + A(\sigma) \ln b + \dots \right] \quad (14)$$

wobei $A(\sigma) = \psi(1) + \psi(\sigma) - 2\psi(\sigma/2)$

Damit erhalten wir die Rekursionsformeln für u und Δ , die von derjenigen für r bis einschließlich $O(\epsilon^2)$ entkoppelt sind:

$$\begin{aligned} u' &= b^\epsilon \left\{ u - 4K_d \ln b \left(1 + \frac{\epsilon}{2} \ln b\right) (n+8) u^2 + 6u\Delta + \right. \\ &\quad + 16 K_{2\sigma}^2 \ln^2 b ((n^2+6n+20) u^3 + 9(n+4) u^2 \Delta + 27 u \Delta^2) \\ &\quad + 32 A(\sigma) K_{2\sigma}^2 \ln b (1 + \ln b) (13n+42) u^2 \Delta + 72 u \Delta^2 + 27 \Delta^3) \\ \Delta' &= b^\epsilon \left\{ \Delta - 4K_d \ln b \left(1 + \frac{\epsilon}{2} \ln b\right) (12u\Delta + 9\Delta^2) \right. \\ &\quad + 16 K_{2\sigma}^2 \ln^2 b (36 u^2 \Delta + 54 u \Delta^2 + 27 \Delta^3) \\ &\quad \left. + 32 A(\sigma) K_{2\sigma}^2 \ln b (1 + \ln b) ((3n+42) u^2 \Delta + 72 u \Delta^2 + 27 \Delta^3) \right\} \end{aligned} \quad (15)$$

Der Heisenberg-Fixpunkt ist gegeben durch

$$\Delta_H^* = 0, \quad u_H^* = \frac{\epsilon}{4K_d(n+8)} + 6A(\sigma) \frac{n^2+4n+28}{(n+8)^3} \epsilon^2 + O(\epsilon^3) \quad (16)$$

Die Linearisierung um den Heisenberg-Fixpunkt ergibt

$$\begin{pmatrix} u' - u_H^* \\ \Delta' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} u - u_H^* \\ \Delta \end{pmatrix} \quad (17)$$

wobei die Matrix M mit ihrem größten Eigenwert λ_H^H die Stabilität des Heisenberg-Fixpunkts gegen die kubische Störung. Es gilt

$$\lambda_H^H = \frac{n-4}{n+8} \epsilon + 6A(\sigma) \frac{n^2+4n+28}{(n+8)^3} \epsilon^2 + O(\epsilon^3) \quad (18)$$

Dieser Eigenwert ist wenn auch nicht gleich so doch proportional zu $\alpha_2 - \alpha_1$; ebenso gibt es einen Zusammenhang mit dem crossover-Exponent φ_Δ . Es gilt

$$\varphi_\Delta = \nu \lambda_H^H = -\nu (2-\gamma) (\alpha_2 - \alpha_1) = \gamma (\alpha_1 - \alpha_2) \quad (19)$$

Daraus erhält man sofort die ϵ -Entwicklung für $\alpha_2 - \alpha_1$, von der wir nur die niedrigste Ordnung (dasselbe Resultat erhält man für $\Delta > 0$ aus einer Diagrammentwicklung)

$$\alpha_2 - \alpha_1 = \frac{n-4}{n+8} \frac{\epsilon}{\sigma} + O(\epsilon^2) \quad (20)$$

als 'check' und zum Vergleich für das obiges $O(1/n)$ -Resultat heranziehen wollen. Diese Resultate sind konsistent, man erkennt aber, daß

$$\bar{n} = 4 + O(\epsilon) \quad \text{unabhängig von } d \text{ und } \sigma \quad (21)$$

und dies ist der exakte Wert für $\epsilon \rightarrow 0$. In $O(1/n)$ wird dieser Wert also beträchtlich überschätzt. Für die erwähnten $d=1$ - und $d=2$ -XY- und Heisenberg-Modelle stimmen die Prognosen in $O(\epsilon^2)$ und $O(1/n)$ im Hinblick auf zu erwartendes kubisches Verhalten überein. Das gleiche gilt für die qualitative Aussage, daß längere Reichweiten der Wechselwirkung das isotrope Verhalten begünstigen.

Die Linearisierung der Rekursionsformeln um den kubischen Fixpunkt soll im folgenden zur Berechnung der Exponenten γ_c und ν_c ausgeführt werden, um herauszufinden, ob die kubischen Exponenten sich im LR-Fall von den isotropen Exponenten ebenso wenig unterscheiden wie im SR-Fall. Für γ und ν benötigen wir die Rekursionsformel des dritten Parameters von BH nach u und Δ , nämlich r :

$$r' = b^\sigma \left\{ r + 4((n+2)u + 3\Delta) \int_q (q^\sigma + r)^{-1} - 32((n+2)u^2 + 6u\Delta + 3\Delta^2) \int_{p,q} \frac{1}{q^\sigma + r} \frac{1}{p^\sigma + r} \frac{1}{|p+q|^\sigma + r} \right\} \quad (22)$$

Die Linearisierung um den kubischen Fixpunkt ergibt nach Auswertung der Selbstenergiediagramme, von denen das schwierigste  in $O(\epsilon^2)$ ist:

$$r' - r_c^* = b^\sigma \left\{ 1 - 4K_d((n+2)u_c^* + 3\Delta_c^*) \ln b + \right. \\ \left. + 48K_{2\sigma}^2 A(\sigma)((n+2)u_c^{*2} + 6u_c^*\Delta_c^* + 3\Delta_c^{*2}) \ln b \right\} (r - r_c^*) \quad (23)$$

wobei sich die Fixpunktwerte u_c^* und Δ_c^* aus den Formeln (15a) und (15b) ergeben:

$$u_c^* = \frac{\epsilon}{12K_d n} - \frac{(n-1)(n-6)}{18K_{2\sigma}^2 n^3} A(\sigma) \epsilon^2 + O(\epsilon^3) \\ \Delta_c^* = \frac{\epsilon}{12K_d n} \left(\frac{n-4}{3} + \frac{2(n-1)(n^2+6n-24)}{9n^2} A(\sigma) \epsilon + O(\epsilon^2) \right) \quad (24)$$

Damit finden wir aus (23) die kubischen Exponenten

$$\nu_c = \frac{1}{\sigma} + \frac{2(n-1)}{3n} \frac{\epsilon}{\sigma^2} + \frac{n-1}{9n^3} \left(n(n-1) \frac{\eta}{\sigma} - (n^2 - 18n + 24) A(\sigma) \right) \frac{\epsilon^2}{\sigma^2} + O(\epsilon^3)$$

$$\gamma_c = \sigma \nu_c, \text{ denn } \eta_c = 2 - \sigma + O(\epsilon^3) \quad (25)$$

Der Wert $\gamma_c = 1.58$ für $d=2$, $\sigma=3/2$ ($\epsilon=1$) und $n=3$ unterscheidet sich leider auch nur wenig von dem entsprechenden Heisenberg-Exponenten $\gamma=1.61$, so daß im Rahmen der üblichen Meßfehler eine experimentelle Verifizierung der hier gemachten theoretischen Aussage zur Zeit nicht möglich scheint. Eine Ausnahme könnte ein $n=2$, $d=2$ -System mit geeignetem σ bilden, denn der kubische Fixpunkt ist für $n=2$ mit dem Ising-Fixpunkt entartet, und XY-Exponenten sind von Ising-Exponenten sehr wohl zu unterscheiden.

Wir wenden uns nun dem Modellverhalten unterhalb T_c zu, wobei wir auf die diagrammatische $1/n$ -Entwicklung zurückgreifen (es gibt noch keine RG-Formulierung in der geordneten Phase). Zuerst untersuchen wir die Magnetisierungsabhängigkeit der transversalen Suszeptibilität χ_T auf der Koexistenzkurve. Man erhält $\chi_T \propto M^{-\psi}$ wobei der kritische Exponent ψ in $O(1/n)$ gegeben ist durch

$$\psi = 2 + \frac{48}{n} \frac{\Gamma(d-\sigma) \Gamma^2(\sigma/2) (d-\sigma)^{-1}}{\Gamma(d/2) \Gamma^2(\frac{d}{2}-\frac{\sigma}{2}) \Gamma(\sigma-d/2)} \quad (26)$$

Man kann damit nachprüfen, daß Wallace'skalenrelation

$$\psi = (\delta-1)(1+\alpha_2-\alpha_1) \text{ erfüllt ist.}$$

Im crossover-Bereich von kubischem zu isotropem Verhalten bei $\bar{n}$ findet man aus der Zustandsgleichung die Beziehung

$$\varphi_\Delta = \beta \omega_\Delta = \gamma (\alpha_1 - \alpha_2) = \gamma - \beta \psi \quad (27)$$

wobei φ_Δ und ω_Δ durch folgende Potenzgesetze definiert sind

$$\Delta \propto \tau^{\varphi_\Delta} \quad \text{und} \quad M \propto \Delta^{1/\omega_\Delta} \quad (28)$$

Falls Δ negativ und daher gleich $O(1)$ am Fixpunkt, ist bei noch so kleinem Ausgangswert von Δ die $1/n$ -Entwicklung mit $\Delta=O(1/n)$ (und damit um den isotropen Punkt) auf einen nichtkubischen Bereich mit entsprechender Entfernung zu T_c beschränkt und daher nicht sehr aussagekräftig. Das Gegenteil ist der Fall, falls $0 \leq \Delta = O(1/n)$, denn dann beschreibt die Beziehung zwischen M und Δ die Unstetigkeit der Magnetisierung beim Phasenübergang

1. Ordnung, solange $1/\omega_\lambda$ positiv und endlich. Für $n \rightarrow \bar{n}$ geht $1/\omega_\lambda$ aber gegen unendlich und damit verschwindet der Sprung des Ordnungsparameters wie erwartet dann, wenn die kubische Störung irrelevant wird.

Will man auch für negatives $\Delta=O(1)$ mit Hilfe der $1/n$ -Entwicklung unmittelbar nahe bei T_c Ergebnisse gewinnen, so müssen wir wie in b um das Ising-Modell mit LR-Potential entwickeln. Man kann dann die Schritte in b hier wiederholen und erhält ebenso $\gamma_c = \gamma_I / (1 - \alpha_I)$, wobei γ_I und α_I jetzt die LR-Ising Exponenten darstellen. Dieses Verfahren wird von uns im nächsten Abschnitt auf axial anisotrope Modelle erweitert.

Abschließend und als Ergänzung zu Teil 1 wollen wir den cross-over bzw. shift exponent im LR-Fall mit irrelevanten kubischen Q^4 -Wechselwirkungen (also insbesondere für alle $d=3$ -Modelle) betrachten, den wir ebenso wie in 1. entlang der kritischen Kurve bestimmt haben. Wir erhalten¹⁹

$$\varphi = \frac{\sigma}{d-\sigma} - \frac{1}{n} \frac{4}{d-\sigma} \left[\frac{\Gamma^2(\sigma/2) \Gamma(d-\sigma)}{\Gamma(d/2) \Gamma^2(\frac{d-\sigma}{2}) \Gamma(\sigma-\frac{d}{2})} - \frac{\Gamma^2(\sigma/2) \Gamma(d-\sigma) \left(\Gamma(\frac{d}{2}-\sigma) \Gamma(-\frac{d}{2}+\frac{3\sigma}{2}) \Gamma(\frac{\sigma}{2}) \Gamma(d-\sigma) - \Gamma(\sigma) \Gamma(\frac{d-\sigma}{2}) \Gamma(d-3\sigma/2) \right)}{\Gamma(\sigma) \Gamma(d/2) \Gamma^3(\frac{d-\sigma}{2}) \Gamma(d-\frac{3\sigma}{2})} \right]^{(29)}$$

Dieses Resultat ist konsistent mit dem von Suzuki, Yamazaki und Igarashi¹⁴² bzw. Yamazaki¹⁴³ in $O(\epsilon^2)$:

$$\varphi = 1 + \frac{n}{2(n+8)} \frac{\epsilon}{\sigma} + \dots$$

c. Crossover-Exponent φ_g^C eines axial anisotropen Modells mit kubisch kritischem Verhalten

Ist die Anzahl der leichten Komponenten stets größer als drei, so erwartet man bei gegen null gehender axialer Anisotropie einen crossover vom (reduzierten) m-Vektor kubischen Fixpunkt zum kubischen Fixpunkt mit der vollen $O(n)$ -Symmetrie. Die Berechnung des crossover-Exponenten läßt sich durch die Verallgemeinerung des Verfahrens von Aharony¹⁴⁴ durchführen. Der Größenordnung der Parameter entsprechend wird der Hamiltonian aufgespalten in

$$\beta \mathcal{H}_0 = \int_x \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n (r_{0\alpha} s_{\alpha}^2(x) + (\nabla s_{\alpha}(x))^2) + \frac{\Delta}{4} \int_x \sum_{\alpha} s_{\alpha}^4(x)$$

$$\beta \mathcal{H}_i = \frac{u_0}{4} \int_x \left(\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2(x) \right)^2 ; \quad r_{0\alpha} = \begin{cases} r_0 - \frac{n-m}{n} g & \text{für } \alpha=1..m \quad (1) \\ r_0 + \frac{m}{n} g & \text{für } \alpha=m+1..n \end{cases}$$

wobei der 'freie Teil' $\beta \mathcal{H}_0$ nicht mehr exakt lösbar ist, denn er beschreibt n entkoppelte Isingmodelle, von denen nur die zu den leichten Achsen gehörenden bei $T_C(g=0)$ ordnen, während die $n-m$ anderen kritische Fluktuationen nur bei kleinem g zeigen. Läßt man die allerdings relevante Kopplung dieser Ising-Modelle mit $\beta \mathcal{H}_i$ einmal außeracht, so vermittelt der limes $g \rightarrow 0$ einen crossover zu dem Punkt $T_C(0)$, an dem alle n Ising-Modelle ordnen. Die kritischen Exponenten sind trivialerweise unberührt von diesem crossover, lediglich die Amplituden und damit die absolute Größe etwa der Suszeptibilität wachsen um den Faktor n/m an. Führt man hier den Ising-crossover-Exponenten φ_I ein, so muß diesem der Wert 1 zugeschrieben werden^{19,126}. Wie ändert sich nun dieser Exponent φ_I , wenn man die Kopplung $\beta \mathcal{H}_i$ mitberücksichtigt?

Für die Diagrammentwicklung ist es notwendig, eine Fixpunkt-lokalisierende Größe zur Verfügung zu haben. Die exakten inversen Suszeptibilitätskomponenten des Ising-Modells, $r_{||}^I$ und $r_{\perp}^I = r_{||}^I + g$ wegen $r_{0\perp} = r_{0||} + g$, genügen hier nicht, denn $r_{||}^I$ verschwindet zwar bei $T_C^I(g)$, aber nicht bei der tatsächlichen kritischen Temperatur $T_C(g)$. Wir benutzen daher als freien Propagator den Ising-Propagator, dessen explizite Form wir nicht kennen, und der zudem bei $g=0$ exakt renormiert sein soll, so daß er dort mit dem exakten Propagator des Gesamthamiltonians (2) übereinstimmt:

$$G_{\parallel}(r, q=0) = r^{-1} \quad \text{und} \quad G_{\parallel}^I(r, 0) = r^{-1} \quad (2)$$

wobei $r = r_{\parallel}$ als Fixpunkt-lokalisierende Temperaturvariable neu eingeführt ist. Wesentliche für die spätere Schlußfolgerung ist, daß der Ising-Propagator beim Ersetzen von $r_{\parallel}^I$ durch r seine funktionale Form behält. Durch diese Temperatur-Renormierung wird aber auch das ursprüngliche Temperaturmaß r_0 auf ein r'_0 transformiert (entsprechend $r_{0\perp}$ auf $r'_{0\perp} = r'_{0\parallel} + g$). Während r_0 bei $r=0$ die kritische Temperatur-Verschiebung des vollen Modells (2) mißt, $r_0 = r_0^C$, beschreibt r'_0 die entsprechende Verschiebung für das Ising-Modell, $r'_0 = r_0^{I}$, allerdings auf einer umnormierten Temperaturskala. So ergibt sich folgende sinnvolle Zerlegung des Hamiltonians in

$$\begin{aligned} \beta H_0 &= \frac{1}{2} \int_x \sum_{\alpha} \left(r'_{0\alpha} S_{\alpha}^2(x) + (\nabla S_{\alpha}(x))^2 \right) + \frac{\Delta}{4} \int_x \sum_{\alpha} S_{\alpha}^4(x) \\ \beta H_i &= \frac{u_0}{4!} \int_x \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \right)^2 + \frac{1}{2} \int_x \sum_{\alpha} (r_{0\alpha} - r'_{0\alpha}) S_{\alpha}^2(x) \end{aligned} \quad (3)$$

Die Diagrammentwicklung ergibt dann im sphärischen Limes

$$r_{0\parallel} - r'_{0\parallel} = - \frac{m u_0}{6} \int_q G_{\parallel}^I(r, q) - \frac{(n-m) u_0}{6} \int_q G_{\perp}^I(r, q) \quad (4)$$

und auf der kritischen Linie $r=0$:

$$r_{0\parallel}^C(g) - r_{0\parallel}^{I}(g) = - \frac{m u_0}{6} \int_q G_{\parallel}^I(0, q) - \frac{(n-m) u_0}{6} \int_q G_{\perp}^I(0, q, q) \quad (5)$$

Die Subtraktion dieser Gleichung bei $g=0$ von derselben für $g \neq 0$ ergibt

$$r_{0\parallel}^C(g) - r_{0\parallel}^C(0) = r_{0\parallel}^{I}(g) - r_{0\parallel}^{I}(0) - \frac{(n-m) u_0}{6} \int_q \left(G_{\perp}^I(g, q) - G_{\perp}^I(0, q) \right) \quad (6)$$

Berücksichtigt man nun noch, daß das Integral in (6) proportional zur Ableitung des singulären Teils der freien Energie nach der Temperatur und damit proportional zu $(T_C(g) - T_C(0))^{1-\alpha_I}$ ist, und daß außerdem $r_{0\parallel}^{I}(g) - r_{0\parallel}^{I}(0) \propto g^{1/\varphi_I} = g$ gilt, so folgt

$$\begin{aligned} g^{1/\varphi_g^C} &= c g^{1/\varphi_I} + c' g^{(1-\alpha_I)/\varphi_I} \\ &= c g + c' g^{1-\alpha_I} \end{aligned} \quad (7)$$

wobei die Konstanten c und c' unbekannt und unwesentlich sind, insofern als wir aus der Tatsache, daß die spezifische Wärme des Ising-Modells divergiert, weshalb α_I positiv ist, für $g \rightarrow 0$ aus der Gleichung (7) für den crossover- bzw. shift-Exponent folgern

$$\varphi_g^c = \varphi_I / (1 - \alpha_I) = 1 / (1 - \alpha_I) \quad (8)$$

Damit hat ebenso wie γ auch dieser Exponent die sogenannte Fisher-renormierte Form. Das large- n limit-Resultat läßt es vermuten und Aharony's ϵ -Entwicklung hat dies bestätigt, daß auch φ_g^c nie kleiner als eins sein kann¹⁴⁵ ($\varphi_g^c = 1 + \frac{\epsilon}{6} - \frac{5n^2 - 49n + 53}{81n^2} \epsilon^2$).

3. Axiale Anisotropie und multikritisches Verhalten

a. Vielkomponentensysteme mit kubischer und axialer Anisotropie

Das trikritische Verhalten kann als einfachster Vertreter multikritischen Verhaltens angesehen werden. Wir verwenden hier folgende Definition für trikritische Punkte: an einem trikritischen Punkt muß außer den Bedingungen ($T=T_c$, $H=0$ etc.), unter denen das (einfach)-kritische Verhalten in seiner Umgebung auftritt, noch eine weitere kritische Bedingung erfüllt sein¹⁴⁶⁻¹⁴⁸. Typischerweise verknüpft ein solcher Punkt eine Linie von Phasenübergängen erster Ordnung mit Linien, die Phasenübergänge zweiter Ordnung beschreiben. Charakteristisch für einen trikritischen Punkt ist, daß außer den kritischen Fluktuationen des Ordnungsparameters zusätzlich noch die eines nichtordnenden Feldes auftreten. Die zu diesem nichtordnenden Feld konjugierte Skalenvariable muß am trikritischen Punkt verschwinden, was genau die oben erwähnte zusätzliche Bedingung ist.

Warum darf man nun bei kubisch und axial anisotropen Systemen die Existenz eines trikritischen Punktes vermuten? Die Erklärung besteht aus mehreren Teilen: einerseits wissen wir beispielsweise aus einer Arbeit von Bonner und Nagle¹⁴⁹, daß konkurrierende Wechselwirkungen die Ursache für trikritisches Verhalten sein können; andererseits bedenken wir, daß der Sprung des Ordnungsparameters bei einem kubischen Modell vom SrTiO_3 -Typ mit mehr als drei leichten Komponenten mit der Anzahl der leichten Komponenten zunimmt. Die axiale Anisotropie aber reduziert die Anzahl der leichten Komponenten und steht damit in Konkurrenz zur kubischen Störung. Daß darüberhinaus auch und gerade das Größenverhältnis der beiden Anisotropien eine wichtige Rolle für das trikritische Verhalten spielt, werden wir in diesem Abschnitt kennenlernen. Im Ubrigen interessieren wir uns hier auch für den Einfluß der axialen Anisotropie auf die Eigenschaften des Phasenübergangs erster Ordnung.

Wir betrachten nun einen Hamiltonian vom SrTiO_3 -Typ bei Anwesenheit anisotropen Drucks. Im Gegensatz zu unserem Modell in Kapitel II.1 seien mindestens vier leichte Komponenten gegeben, weshalb die kubische Störung stets relevant ist. Wir können jetzt die Hamiltonfunktion aufschreiben als

$$\beta H = \frac{1}{2} \int_x \sum_{\alpha=1}^n \left[(r_0 + g_{\alpha}) S_{\alpha}^2(x) + (\nabla S_{\alpha}(x))^2 \right] + \frac{u_0}{4!} \int_x \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \right)^2 - \frac{\Delta_0}{4} \int_x \sum_{\alpha} S_{\alpha}^4(x) - H_1 \int_x S_1(x) \quad (1)$$

wobei wir zunächst nur den Parameterbereich $u_0 \gg \Delta_0 \geq 0$ betrachten wollen, der uns die Stabilität des Modells garantiert und außerdem auf die Abschätzung $u_0, \Delta_0 = O(1/n)$ führt. Die axiale Anisotropie ist gegeben durch $g_\alpha = g_\parallel$ für $\alpha = 1 \dots m$ und $g_\alpha = g_\perp$ für $\alpha = m+1 \dots n$ mit $g_\perp - g_\parallel = g \gg 0$.

Da wir Vielkomponentensysteme studieren wollen, bietet sich der sphärische Limes als eine gute Approximation an.

Die Ordnung des Phasenübergangs und das kritische Verhalten in der geordneten Phase läßt sich mit Hilfe der Zustandsgleichung untersuchen. Wir nehmen nun an, daß das System in der leichten Richtung s_1 ordnet, etwa durch ein Feld H_1 induziert, und definieren daher den Ordnungsparameter als $M = \langle s_1 \rangle$. Das zu M konjugierte Magnetfeld H_1 sei im Folgenden mit H bezeichnet. Beide, H wie M , sind von der Größenordnung $\sqrt{n}$. Weiter definieren wir einen Schwankungsoperator L mittels $s_1 = L + \langle s_1 \rangle$ und schreiben den Hamiltonian entsprechend um.

Die Zustandsgleichung erhalten wir durch Diagrammentwicklung von $\langle L \rangle = 0$, was per Definition von L gilt. Im sphärischen Limes ergibt sich:

$$\frac{H}{M} = r_0 + g_\parallel + \frac{u_0}{6} M^2 - \Delta_0 M^2 + \frac{m u_0}{6} \int_q \frac{1}{q^2 + r_\tau''} + \frac{(n-m) u_0}{6} \int_q \frac{1}{q^2 + r_\tau^\perp} \quad (2)$$

worin noch die inversen transversalen Suszeptibilitäten $r_\tau'' = (\int_x \langle S_\alpha(x) S_\alpha(0) \rangle)^{-1}$, mit $\alpha = 2 \dots m$ und $r_\tau^\perp = (\int_x \langle S_\beta(x) S_\beta(0) \rangle)^{-1}$ mit $\beta = m+1 \dots n$ als unbekannte Größen vorkommen. Diese werden durch den Vergleich zwischen Gleichung (2) und den folgenden Selbstenergiebedingungen für die r_τ bestimmt:

$$\begin{aligned} r_0 + g_\perp - r_\tau^\perp + \frac{u_0}{6} M^2 + \frac{m u_0}{6} \int_q (q^2 + r_\tau'')^{-1} + \frac{(n-m) u_0}{6} \int_q (q^2 + r_\tau^\perp)^{-1} &= 0 \\ r_0 + g_\parallel - r_\tau'' + \frac{u_0}{6} M^2 + \frac{m u_0}{6} \int_q (q^2 + r_\tau'')^{-1} + \frac{(n-m) u_0}{6} \int_q (q^2 + r_\tau^\perp)^{-1} &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Damit erhalten wir

$$r_\tau'' = \frac{H}{M} + \Delta M^2, \quad r_\tau^\perp = \frac{H}{M} + \Delta M^2 + g \quad (4)$$

Diesen Gleichungen entnimmt man, daß die transversalen Suszeptibilitäten auf der Koexistenzkurve nicht divergieren können. Dafür ist die früher diskutierte Relevanz der kubischen Symmetrie verantwortlich, wegen der es im Gegensatz zum isotropen Fall Energie kostet, die Magnetisierung aus der s_1 -Achse herauszudrehen. Die senkrechten transversalen Suszeptibilitäten bleiben natürlich auch für $\Delta_0 = 0$ endlich, wenn $g \neq 0$.

Die Zustandsgleichung können wir schließlich ausrechnen, indem wir Gl.(4) in Gl.(2) einsetzen und wie früher die Integrale für kleine r_T 's auswerten. Es erweist sich als zweckmäßig, von diesem Resultat noch die Gl.(2) an einem durch $H=0, M=0$ definierten und mit $T=T_c(g)$ beziehungsweise $r_0=r_{0c}(g)$ bezeichneten kritischen Punkt abziehen. An diesem Punkt findet für $\Delta_0=0$ ein Phasenübergang zweiter Ordnung statt, während derjenige erster Ordnung für $\Delta_0 \neq 0$, den wir hier betrachten wollen, bei einer Temperatur $T_1(g) \neq T_c(g)$ auftritt. Will man bei Phasenübergängen erster Ordnung eine sinnvolle Beschreibung durch kritische Exponenten angeben, so muß man sich auf die Übergänge mit kleinen Diskontinuitäten beschränken, für die dann $T_1 - T_c$ eine kleine Größe ist. Daher ist es sinnvoll, die Temperatur von T_c aus zu messen. Dazu definieren wir $t(g) = T - T_c(g)$. Dann gilt auch $r_0 - r_{0c}(g) = t(g) + O(t(g)^2)$. Nach einer Normierung der Temperaturen und Felder, deren Details im Anhang stehen, ergibt sich die Zustandsgleichung im sphärischen Limes als:

$$\frac{H}{M} + \Delta M^2 = t(g) + M^2 - \frac{m}{n} \left(\frac{H}{M} + \Delta M^2 \right)^{1-\epsilon/2} - \frac{n-m}{n} \left[\left(\frac{H}{M} + \Delta M^2 + g \right)^{1-\epsilon/2} - g^{1-\epsilon/2} \right] \quad (5)$$

Man beachte, daß nicht nur $\Delta_0 = O(1/n)$ durch $\Delta = \Delta_0 / (6u_0) = O(1)$ ersetzt ist, sondern daß auch die normierten H und M von $O(1)$ sind. Unabhängig davon werden im folgenden nur kleine H und M betrachtet.

Für beliebige aber große m und n ist die Gleichung (5) eine gute Approximation und im Limes $n \rightarrow \infty$ wird sie exakt. Die Quotienten m/n und $(n-m)/n$ sind als Grenzwerte für $n \rightarrow \infty$ zu verstehen, so daß m/n eine endliche Konstante ist, wenn eine relevante Anzahl $m=O(n)$ von leichten Komponenten vorliegt. Im extrem anisotropen Fall dagegen, der durch $m=O(1)$ definiert ist, ergibt sich $m/n \rightarrow 0$.

Als Grundlage der nachfolgenden Diskussion soll zunächst der Fall mit $g=0$ betrachtet werden. Aus Gleichung (5) erhält man für kleine H und M im nichttrivialen Bereich $0 < \epsilon < 2$ die asymptotisch exakte Zustandsgleichung (in Übereinstimmung mit Wallace' Berechnung¹¹⁹) für den axial isotropen Teil unseres Modells als

$$0 = t(0) + M^2 - \left(\frac{H}{M} + \Delta M^2 \right)^{1-\epsilon/2} \quad (6)$$

Man kann an dieser Gleichung ablesen, daß die $(M=0)$ -Lösung für $H=0$ und $t(0)=0$ nicht auf kontinuierliche Weise mit $M \rightarrow 0$ von $t(0) < 0$ aus erreicht werden kann, was auf einen Phasenübergang erster Ordnung

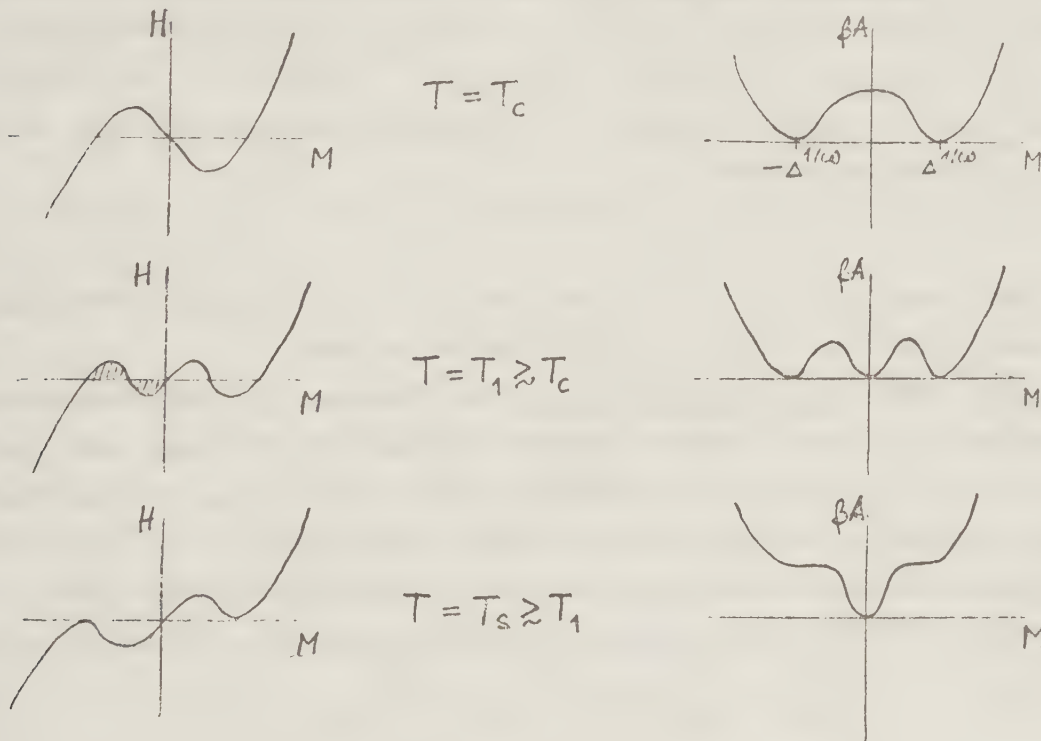
schließen läßt. Man kann mit der Lösung $H(M)$ aus Gl.(6) direkt die Helmholtz-Energie berechnen und findet bei $t(0)=0$ als stabile, βA minimisierende Lösung nicht $M=0$, sondern:

$$M = \Delta^{1/\omega} \quad \text{mit} \quad \omega = 2\epsilon/(2-\epsilon) + O(1/n) \quad (7)$$

Der Phasenübergang findet allerdings bei einer etwas höheren Temperatur $T_1 \gtrsim T_c$ statt, wobei T_1 durch $\beta A(M \neq 0) = \beta A(M=0)$ bestimmt wird (siehe dazu auch untenstehende Skizze). $T_1(g=0)$ wurde von Wallace¹¹⁹ durch eine implizite Gleichung gegeben. Der Sprung des Ordnungsparameters bei T_1 ist im wesentlichen wieder durch Gl.(7) gegeben. Daher kann man auch von dem Skalenverhalten des Ordnungsparameter-Sprungs mit $M \propto \Delta^{1/\omega}$ für $\Delta \rightarrow 0$ sprechen. Es stellt sich heraus, daß $t(0)=0$ die Stabilitätsgrenze der ungeordneten Phase ist, während die der geordneten Phase gegeben ist durch

$$t_s = (\gamma-1) \gamma^{2/\epsilon} \Delta^{2/\omega} \quad \text{mit} \quad \gamma = 2/(2-\epsilon) \quad (8)$$

Folgende Skizze von H-M- und βA -M-Diagrammen beschreibt den Stabilitätsbereich des diskontinuierlichen Phasenübergangs



Wir wenden uns nun dem axial anisotropen Fall zu:

Für kleine Werte von $g/\Delta^{2/\epsilon}$ ergeben sich nur kleine Korrekturen zur isotropen spontanen Magnetisierung. Für große $g/\Delta^{2/\epsilon}$ dagegen, jedoch noch im Bereich $r_T = H/M + \Delta M^2 + g \ll (\epsilon/2)^{2/\epsilon} \Lambda = c_\Lambda$, in dem die Gl. (5) gültig ist, kann man die Zustandsgleichung nach $\Delta M^2/g$ entwickeln und erhält für $H=0$

$$0 = t(g) - \frac{m}{n} \Delta^{1-\epsilon/2} M^{2-\epsilon} + Q(\Delta, g) M^2 + \frac{n-m}{n} \frac{\epsilon}{4} (1-\frac{\epsilon}{2}) \Delta^2 g^{-(1+\epsilon/2)} M^4 + \dots \quad (9)$$

wobei

$$Q(\Delta, g) = 1 - \Delta - \frac{n-m}{n} (1-\epsilon/2) \Delta g^{-\epsilon/2}.$$

Sei m/n endlich. In diesem Fall verschwindet der negative $M^{2-\epsilon}$ -Term in Gl.(9) nicht und da dieser die führende Potenz für $M \rightarrow 0$ besitzt, kann M bei keiner Temperatur kontinuierlich gegen null gehen, weshalb der Phasenübergang wie im axial-isotropen Fall von erster Art ist. Im Bereich $\Delta^{2/\epsilon} \ll g \ll c_\Lambda$ finden wir die stabile Lösung $M_n(\Delta, g)$ bei $T_c(g)$ und näherungsweise auch den Sprung der Magnetisierung bei $T_1(g) \approx T_c(g)$ gegeben durch

$$M_n(\Delta, g) \cong \left(\frac{m}{n}\right)^{1/\epsilon} \Delta^{(2-\epsilon)/(2\epsilon)} + \frac{1-\epsilon/2}{\epsilon} \left(\frac{m}{n}\right)^{1/\epsilon} \frac{n-m}{n} \Delta^{(2+\epsilon)/(2\epsilon)} g^{-\epsilon/2}. \quad (10)$$

Diese Gleichung zeigt, daß anwachsende axiale Anisotropie den Sprung des Ordnungsparameters verkleinert. Für $m/n \neq 0$ kann die spontane Magnetisierung aber nicht kleiner als der endliche reduzierte m -Vektor-Sprung $M_m(\Delta, 0) = (m/n)^{1/\epsilon} M_n(\Delta, 0)$ eines kubischen m -Vektor-Modells mit $g=0$ werden. Im Bereich $c_\Lambda \gg g \gg \Delta^{2/\epsilon} = \text{const.}$ verringert sich die Differenz beider Sprünge bei wachsendem g gemäß dem unkonventionellen Skalenverhalten

$$M_n(\Delta, g) - M_m(\Delta, 0) \propto g^{-\epsilon/2} \quad (11)$$

Für $g \rightarrow \infty$ kommt man in den trivialen Bereich, in dem die verbliebene Differenz wie $M_n(\Delta, g) - M_m(\Delta, 0) \propto g^{-2}$ verschwindet.

Sei nun $m=0(1)$, d.h. $m/n \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$. In diesem extrem anisotropen Fall verschwindet der $M^{2-\epsilon}$ -Term in der Zustandsgleichung und man erkennt, daß die Ordnung des Phasenübergangs durch das Vorzeichen des M^2 -Koeffizienten $Q(\Delta, g)$ bestimmt wird. Für $Q(\Delta, g) > 0$ findet man einen kontinuierlichen Übergang, denn der für endliche n noch existente Sprung des Ordnungsparameters verschwindet im sphärischen Limes wie

$$M_n(\Delta, g) \propto n^{-1/\epsilon} \quad \text{für } n \rightarrow \infty \quad (12)$$

Durch Vergleich mit der Definition $t(n) \propto n^{-1/\varphi}$, wobei $t(n) = T_c(n, \dots) - T_c(\dots)$, und dem Skalenverhalten $M \propto t^{1/2}$ lesen wir für den cross-over-Exponenten φ den Wert $\varphi = \epsilon/2$ ab. Dieser Wert ergibt sich nach Hikami¹⁵⁰ auch beim crossover vom m -Vektor- zum MF-Verhalten eines extrem anisotropen n -Vektor-Modells ohne kubische Störungen.

In unserem Fall jedoch beschreibt derselbe Wert von φ den crossover zwischen diskontinuierlichem und kontinuierlichem Verhalten, weshalb φ von dem Typ ist, den Lubensky und Priest⁶⁰ sowie Halperin et al⁵⁷ bei nematisch-smektisch-A Übergängen in flüssigen Kristallen sowie bei Supraleitern diskutiert haben.

Da wir bereits wissen, daß der Phasenübergang in unserem Modell bei genügend kleinem $g \geq 0$ und festem Δ von erster Ordnung ist, erwarten wir einen Wechsel der Ordnung bei einem bestimmten Wert $g = g_t(\Delta)$. Diese zusätzliche Bedingung beschreibt dann einen trikritischen Punkt oder sogar eine trikritische Linie, wenn Δ auch als (experimentell zugängliche) Variable aufgefaßt werden darf.

Weil in der Nähe des trikritischen Punktes M gegen null geht, darf man für endliches g stets nach $\Delta M^2/g$ entwickeln und insbesondere gilt die Entwicklung (9) der Zustandsgleichung (5). Da das kritische Verhalten des extrem anisotropen n -Vektor-Modells im sphärischen Limes stets Molekularfeld-Charakter hat, ist es einleuchtend, daß die Zustandsgleichung von der aus der Landau-Theorie bekannten Form ist. Demnach lautet die trikritische Bedingung $Q(\Delta, g) = 0$. Die explizite Form der trikritischen Bedingung heißt dann

$$g^{\epsilon/2} = (1 - \epsilon/2) \Delta / (1 - \Delta) \quad (13)$$

Wir bemerken, daß diese trikritische Bedingung unabhängig vom Abschneideimpuls ist.

Auf der durch Gl.(13) gegebenen Linie finden wir überall die klassischen trikritischen Exponenten, ie $\beta_t = 1/4$, $\delta_t = 5$ etc., solange man im kritischen Bereich ist und $0 < \epsilon < 2$ gilt. Die klassischen Werte der trikritischen Exponenten bestätigen den MF-Charakter des extrem anisotropen Modells im sphärischen Limes.

Wir wollen jetzt den Einfluß der axialen Anisotropie auf die Breite des Stabilitätsbereichs, die am trikritischen Punkt gegen null gehen muß, untersuchen. Dazu haben wir die Helmholtz-Energie berechnet und aus $0 = \frac{\partial^2 \Delta A}{\partial M^2} \Big|_{M_S}$ die Stabilitätsgrenze der geordneten, oberhalb $T_c(g)$ metastabilen Phase bestimmt als

$$t_S(\Delta, g) = (1 - \epsilon/2)^{2/\epsilon - 1} \frac{\epsilon}{2} \left(\frac{\Delta}{1 - \Delta} \right)^{(2 - \epsilon)/(2\epsilon)} - \left(g^{1 - \epsilon/2} - g \frac{1 - \Delta}{\Delta} \right) \quad (14)$$

Die rechtsstehende Klammer kann nicht negativ werden, denn dieses Resultat gilt nur im Bereich erster Ordnung. Man sieht, daß bei festem

der Stabilitätsbereich für anwachsendes g enger wird, um im Grenzfall der trikritischen Bedingung schließlich ganz zu verschwinden, ie $t_S(\Delta, ((1 - \epsilon/2) \Delta / (1 - \Delta))^{2/\epsilon}) = 0$.

Abschließend bemerken wir, daß für $\Delta \rightarrow 1$ die trikritische Bedingung in der Form von Gleichung (13) natürlich nicht mehr erhalten bleibt, denn $\Delta \rightarrow 1$ würde $g \rightarrow \infty$ bedeuten, was die Bedingung $g \ll c_\Delta$ verletzt. Gehen wir aber auf die Zustandsgleichung (2) zurück, dann zeigt sich, daß das trikritische Verhalten auch für $\Delta \rightarrow 1$ und $g \rightarrow \infty$ erhalten bleibt, wenn auch der Exponent von g in Gl.(13) zu ändern ist. Der Grenzfall $\Delta=1$ führt uns jetzt auf Modelle, in denen positive s^6 -Wechselwirkungen berücksichtigt werden müssen, weil anderenfalls ein negativer $O(s^2)$ - und ein bei $\Delta=1$ verschwindender- oder bei $\Delta>1$ sogar negativer $O(s^4)$ -Energie-Anteil keine stabile 'Spin'-Konfiguration ermöglichen würde.

b. Axial anisotrope s^6 -Modelle

Das bekannteste s^6 -Modell ist das nach Blume, Emery und Griffith benannte BEG-Modell mit einem einkomponentigen komplexen Ordnungsparameter, das in der kontinuierlichen Wilson'schen Form von einigen Autoren zur Beschreibung des kritischen Verhaltens von He^3 - He^4 -Mischungen benutzt wurde^{25,151,152}. Dieses Modell ist durch folgende Hamiltonfunktion gegeben

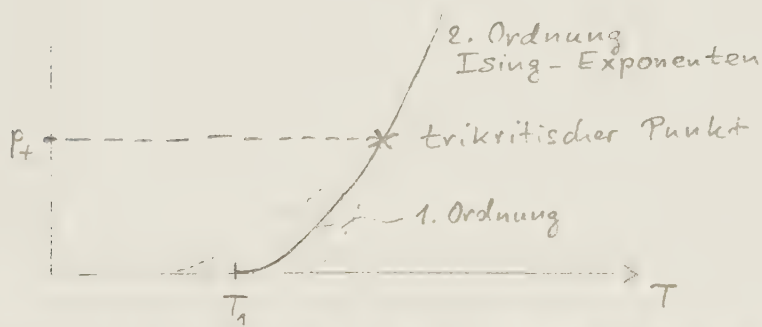
$$\beta H = \frac{1}{2} \int_x (r_0 s^2(x) + (v s(x))^2) + u_0 \int_x (s^2(x))^2 + v_0 \int_x (s^2(x))^3 - H \int s, \quad (1)$$

Amit und De Dominicis haben eine n-komponentige Verallgemeinerung des BEG-Modells benutzt, um unabhängig von einer (3-d)-Entwicklung qualitative Resultate mit Hilfe einer $1/n$ -Entwicklung zu erhalten. Die Resultate sind konsistent mit denen von Riedel und Wegner's (3-d)-Entwicklung^{147,148,151-153} und besagen, daß die He^3 - He^4 -Mischung dann trikritisch wird, wenn außer der Ordnungsparameter-Korrelationsfunktion $\langle s_{q^3} s_{-q} \rangle$ auch die Korrelationsfunktion $\langle s_q^2 s_{-q}^2 \rangle / n$ der nicht-ordnenden He^3 -Dichte divergiert. Im sphärischen Limes lautet die trikritische Bedingung $Q = 4nu_0 + 12n^2 v_0 D(\Lambda) = 0$, wobei $D(\Lambda)$ der Wert einer Diagramm-Schleife bei T_c ist. Man beachte, daß die trikritische Bedingung nur durch negative u_0 erfüllt werden kann. Gleiches gilt für den Bereich $Q < 0$, in dem die Phasenübergänge von erster Ordnung sind. Der Bereich von Phasenübergängen zweiter Ordnung ist durch $Q > 0$ gegeben und umfaßt also auch kleine negative Werte von u_0 , die zusammen mit v_0 -Beiträgen effektiv zu einer positiven s^4 -Kopplung führen.

Die Erweiterung des Modells (1) durch zusätzliche axiale Anisotropie, die wir in diesem Abschnitt betrachten wollen, ist in der Natur bei kompressiblen Magneten und bei kompressiblen Gittern mit order-disorder Übergängen realisiert. Wir interessieren uns hier besonders für das zur zweiten Gruppe gehörende NH_4Cl und benutzen als Grundlage den Wagner-Swift Hamiltonian⁴⁰. Aus diesem Modell hat Aharony⁴⁸ den führenden kritischen Anteil extrahiert und damit einen Wilson-Hamiltonian vom Typ der Gleichung (1) mit $n=1$ abgeleitet. Die einzige Feldvariable dieses s^6 -Ising-Modells geht auf den Quanten-Pseudospin mit Quantenzahl $1/2$ des ursprünglichen NH_4Cl -Modells zurück, der die beiden Einstellmöglichkeiten der NH_4 -Tetraeder im einfach kubischen Cl-Gitter und damit den order-disorder Übergang beschreibt. Die Kopplung dieser Spins an die Freiheitsgrade des kompressiblen Gitters erzeugt eine indirekte langreichweitige Spin-

Wechselwirkung, die die Ursache für die bemerkenswerte Temperatur-Abhängigkeit $u_0 = \text{const.} (T - T_a)$ der s^4 -Kopplungskonstanten im Wilson-Hamiltonian ist. Sollte also die kritische Temperatur niedriger sein als die durch Kompressibilität, Grüneisen-Konstante etc. bestimmte Temperatur T_a , so würde in der Nähe von T_c der vorher geschilderte interessante Fall mit negativem u_0 eintreten. Dies kann im Falle von NH_4Cl nicht mit letzter Sicherheit gesagt werden. In Aharony's Modell werden die Gitterfreiheitsgrade, ie die Phonon-Variablen, durch harmonische Näherung von den Spins entkoppelt. Betrachtet man das folgende (experimentell abgesicherte) Phasendiagramm von NH_4Cl unter Druck (siehe auch Einleitung)

P



und berücksichtigt unsere Erfahrung, daß Druck, der die axiale Anisotropie verändert, Übergänge zwischen 1.Ordnungs-, 2.Ordnungs- und trikritischem Verhalten erzeugen kann, so liegt es na e, auch die nichtkritischen Phonon-Variablen und den Druck durch geeignete Ankopplung an alle Feldquadrate mitzubüberücksichtigen. Letzteres kann über den Wagner-Swift Hamiltonian durch die Druckabhängigkeit der elastischen Konstanten begründet werden. Die $O(s^4)$ - und erst recht die $O(s^6)$ -Kopplungen werden als isotrop angenommen, weil bei nur einer kritischen Komponente der isotrope kritische Punkt attraktiv ist^{*}. Wir wollen daher von folgender Hamiltonfunktion ausgehen

$$\beta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_x \sum_{\alpha} \left[(r_0 + g_{\alpha}) S_{\alpha}^2(x) + (\nabla S_{\alpha}(x))^2 \right] + \int_x \left[u_0 \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \right)^2 + v_0 \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha}^2(x) \right)^3 - H S_{\alpha}(x) \right] \quad (2)$$

wobei $r_0 \propto T - T_{c0}$, $u_0 = O(1/n)$ und $0 < v_0 = O(1/n^2)$. Die Anisotropie ist gegeben durch $g_{\alpha} = -c_{\parallel} p$ für $\alpha = 1 \dots m$, $g_{\alpha} = c_{\perp} p$ für $\alpha = m+1 \dots n$ und $g = g_{\perp} - g_{\parallel} = c - (c_{\perp} - c_{\parallel}) p$ mit $c > 0$. Beim NH_4Cl ist $m=1$. Eine sinnvolle

Anwendung des sphärischen Limes mit dem Ziel, qualitativ relevante Resultate zu erhalten, sollte von einem auf den realen Wert fixierten Quotienten m/n , etwa hier $1/4$, ausgehen.

Wir wenden nun wie beim kubisch-axial-anisotropen s^4 -Modell die $1/n$ -Entwicklung an und erhalten die Zustandsgleichung als

$$\frac{H}{M} = t(g) + 4 u_0 (I - I_c) + 6 v_0 (I^2 - I_c^2) + Q(g) M^2 + 6 v_0 M^4 \quad (3)$$

wobei wiederum $H, M = s_1 = 0(\sqrt{n})$ und

$$I = m \int_q (q^2 + r_T'')^{-1} + (n-m) \int_q (q^2 + r_T^\perp)^{-1} \quad (4)$$

I_c ist der Wert von I bei $t(g) = T - T_c(g) = 0$. Der M^2 -Koeffizient ist gegeben durch

$$Q(g) = 4 u_0 + 12 v_0 I_c \quad (5)$$

Die transversalen Suszeptibilitätskomponenten werden aus den folgenden Selbstenergiebedingungen bestimmt

$$0 = * + \text{Diagramm } \frac{\text{Loop}}{u_0} + \text{Diagramm } \frac{\text{Loop}}{v_0} + O(1/n) ; \quad * \equiv r_0 + g_\alpha - r_\alpha \quad (6)$$

und wir erhalten

$$r_T'' = H/M \quad \text{und} \quad r_T^\perp = H/M + g \quad (7)$$

Hier verschwindet r_T formal auf der Koexistenzkurve, weil die kubische Störung irrelevant ist. Dies gilt aber bestenfalls nur asymptotisch exakt für $T \rightarrow T_c(g)$, denn ansonsten sind kubische Korrekturen wesentlich (und endlich).

Die $(H=0)$ -Lösung der Zustandsgleichung ergibt sich als

$$0 = t(g) + Q(g) M^2 + 6 v_0 M^4 \quad (8)$$

mit
$$Q(g) = Q(0) - 12 (n-m) F v_0 g^{1-\epsilon/2} \quad (9)$$

Folglich ist der Phasenübergang von erster Ordnung, wenn $Q(g)$ negativ, und von zweiter Ordnung, wenn $Q(g)$ positiv. Bei festem u_0 und v_0 mit $-3nv_0 D(\Lambda) < u_0 < -3mv_0 D(\Lambda)$ kann die axiale Anisotropie trikritisches Verhalten erzeugen, indem die trikritische Bedingung erfüllt wird, welche lautet

$$Q(g_t) = 0 \quad \Rightarrow \quad g_t = \{ Q(0) / (12 (n-m) F v_0) \}^{1/(1-\epsilon/2)} \quad (10)$$

Gleichung (9) zeigt, daß der Beitrag der axialen Anisotropie zu $Q(g)$ immer negativ ist, weshalb bei diesem Modell im Gegensatz zum kubischen s^4 -Modell der Bereich der Phasenübergänge erster Ordnung mit wachsendem g vergrößert wird. Im Bereich kontinuierlicher Übergänge ist das kritische Verhalten vom m -Vektor Typ, das heißt es ergeben sich Ising-Exponenten in unserem NH_4Cl -Modell. Der im Phasendiagramm eingezeichnete trikritische Druck des Ammoniumchlorids ist danach gegeben durch

$$p_t = (g_t - c) / (c_I - c_{II}) \quad (11)$$

Unter der Bedingung $c_I > c_{II}$ folgt, daß die Phasenübergänge im Niederdruck-Bereich $p < p_t$ von erster Ordnung sind. Die Existenz dieses Bereichs und damit des trikritischen Punkts hängt hier allerdings an der Bedingung $Q(c) < 0$, von der man auch unabhängig von axialer Anisotropie nicht weiß, ob sie erfüllt ist. Dies aber vorausgesetzt, beschreibt unser Modell das kritische Verhalten von NH_4Cl qualitativ richtig. Am trikritischen Punkt sollten außer klassischen Exponenten auch logarithmische Korrekturen für $d=3$ auftreten¹⁵², welche wir hier nicht betrachtet haben.

Abschließend seien zwei wesentliche Einwände gegen solche a priori kontinuierlichen Modelle für NH_4Cl erwähnt:

1. ist es bisher ungeklärt, ob man ein System mit der strikten Beschränkung auf nur zwei Einstellmöglichkeiten seiner Spins $s=\pm 1/2$ nach kontinuierlicher Verallgemeinerung und etwa Berücksichtigung von Spin-Phonon-Wechselwirkungen durch ein Modell mit drei bevorzugten Spinwerten $s=\pm 1, 0, -1$ beschreiben kann (wie hier mit einem s^6 -Modell getan).

* und 2. eine neuere und detailliertere Theorie von Horner¹⁵⁴ berücksichtigt eine nur im diskreten Gitter existierende Beschränkung der Gitter-vermittelten Spin-Wechselwirkungen und schreibt als Folge bestimmter Kopplungsanisotropien in $O(s^4)$, die in unserem groben Modell vernachlässigt wurden, auch instabilen Fixpunkten eine besondere Bedeutung für NH_4Cl und NH_4Br zu.

4. Ein erweitertes Potts-Modell

Die physikalische Motivation für das Studium von Potts-Modellen haben wir bereits in der Einleitung ausführlich dargelegt, woran sich jetzt die konkrete Behandlung eines verallgemeinerten Potts-Modells anschließen soll.

Wir wollen zunächst erinnern, daß das Potts-Modell mit drei äquivalenten Zuständen in einem zweidimensionalen Spinraum kürzlich in der kontinuierlichen Version a la Wilson von Amit und Shcherbakov (AS) mit Hilfe der Callan-Symanzik Gleichungen studiert worden war^{64, 155}. Die dabei verwendete ϵ -Entwicklung führte zu dem Schluß, daß das Modell für jede noch so kleine Kopplungskonstante u_3 des $O(s^3)$ -Wechselwirkungsterms einen Phasenübergang erster Ordnung haben sollte. Dies wäre in voller Übereinstimmung mit den Symmetrie-Kriterien der Landau-Theorie, welche aber Renormierungseffekte nur im Sinne der MFA mitnimmt. Da die ϵ -Entwicklung auch nicht unfehlbar ist und die Landau-Theorie nicht hinreichend sichere Ergebnisse liefern kann, hat es Versuche gegeben, den Einfluß kritischer Fluktuationen auf andere Weise abzuschätzen. Hochfeld-Entwicklungen HFE von Enting¹⁵⁶ haben den Verdacht genährt, daß der Übergang kontinuierlich sei. Solange man aber nicht weiß wie groß der eventuelle Sprung des Ordnungsparameters ungefähr ist, ist die HFE ungeeignet, um eine Diskontinuität prinzipiell auszuschließen. Dagegen konnte Baxter 1974 durch exakten Nachweis eines kontinuierlichen Phasenübergangs bei $d=2$ ¹⁵⁷ einen wichtigen Anstoß geben, der auch zur Untersuchung desselben Problems mit Hilfe von Renormierungstheorien und damit hoffentlich auch zum Verständnis des kritischen Verhaltens führen wird. Ebenfalls 1974 hatte Alexander⁶³ in einem allerdings nicht konsistenten Verfahren durch Abschätzung transversaler (Winkel-)Fluktuationen um die der Ordnung parallele leichte Achse die Existenz eines Bereichs kleiner u_3 finden können, in dem der Phasenübergang auch bei $d=3$ kontinuierlich sein sollte. Da er aber die Kopplung der transversalen- an die longitudinalen Fluktuationen vernachlässigt hat, ist sein Resultat zweifelhaft.

Nach dem Verständnis der Wilson-Theorie gibt es zwei Möglichkeiten für das Potts-Modell, einen kontinuierlichen Phasenübergang zu zeigen:

1. bei relevanter u_3 -Störung müßte ein stabiler Fixpunkt mit $u_3^* \neq 0$ existieren, was aber nach den RG-Ergebnissen^{64, 158} auszuschließen ist.
2. könnte die u_3 -Störung irrelevant sein.

Der zweite Fall, der von AS für das Potts-Modell mit $n=3$ beantwortet wurde, entspräche der Situation beim SrTiO_3 , wo die Irrelevanz der kubisch-quartischen Störung zu einem stetigen Phasenübergang führte. Wir wollen die Frage nach der Relevanz der u_3 -Störung bei einem n -komponentigen Potts-Modell wieder aufgreifen, das aus $n/2$ einfachen Potts-Modellen besteht, die über eine isotrope 4-Spin-Wechselwirkung verkoppelt sind. Für $n=2$ ist dieses erweiterte Modell mit dem Potts-Modell identisch. Die Erweiterung hat den Vorteil, daß man die $1/n$ -Entwicklung anwenden kann. Diese Entwicklung ist der notwendige Test dafür, ob die ϵ -Entwicklung etwa durch Beiträge in höherer Ordnung von ϵ falsch ist oder nicht. Wegen dem möglicherweise asymptotischen Charakter der ϵ -Entwicklung ist das natürlich umso wichtiger. Außerdem hat sich der Parameter n schon bei den kubisch-quartischen Störungen als nützlicher Testparameter für deren Relevanz erwiesen. Wir werden daher und als Kontrolle der $1/n$ -Entwicklung auch die ϵ -Entwicklung für das erweiterte Modell ausführen und die Analogie zwischen den Effekten der u_3 - und der Δ -Störung ($\Delta \geq 0$) untersuchen.

Das oben beschriebene erweiterte Potts-Modell ist durch die folgende Hamiltonfunktion in kontinuierlicher Form gegeben

$$\beta \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_x \sum_{t=1}^2 \sum_{\alpha=1}^{n/2} \left[r_0 s_{t\alpha}^2(x) + (\nabla s_{t\alpha}(x))^2 \right] + \frac{u_4}{4!} \int_x \left(\sum_{t\alpha} s_{t\alpha}^2 \right. \\ \left. - \frac{u_3}{3} \int_x \sum_{\alpha} (s_{1\alpha}^3 - 3 s_{1\alpha} s_{2\alpha}^2) - \int_x \sum_{t\alpha} H_{t\alpha} s_{t\alpha} \right. \quad (1)$$

wobei u_3 positiv und klein sein soll, so daß wir um den isotropen Fixpunkt entwickeln und dort die Relevanz der u_3 -Störung betrachten können.

Zuerst leiten wir die Zustandsgleichung für Modell (1) im sphärischen Limes ab, um die Abhängigkeit der spontanen Magnetisierung von u_3 zu erhalten. Es sei dazu angenommen, daß das System entlang der s_{11} -Achse ordnet, weil dort eines der absoluten Minima der Energie (für alle $H_{t\alpha}=0$) liegt. Im weiteren definieren wir $M=\langle s_{11} \rangle$, $H=H_{11}$, $H_{t\alpha}=0$ für alle transversalen Komponenten. Die Abschätzung der Größenordnung liefert, daß M^2 , H^2 , u_3^{-2} und u_4^{-1} sämtlich von $O(n)$ sind. Unter Beachtung dieser Ergebnisse erhalten wir folgenden Satz von Propagatoren für die geordnete Phase:

$$G_T(q) = (q^2 + u_3 M)^{-1}, \quad T \in \{t, \alpha: t \neq 1\}; \quad G_T^H(q) = (q^2 + u_3 M + H/M)^{-1} \quad (2)$$

$$g_{21}(q) = (q^2 + 3u_3 M)^{-1} ; \quad g_L(q) = (q^2 + \frac{2M^2}{n} \pi^{-1}(q, M) - u_3 M)^{-1}$$

Die Bedingung, daß die Entwicklungsterme des gemittelten longitudinalen Schwankungsoperators Ordnung für Ordnung verschwinden, liefert uns die Zustandsgleichung auf analogem Wege wie zuvor in den Abschnitten 2 und 3. Im sphärischen Limes erhalten wir:

$$\frac{H}{M} = t + \frac{u_4}{2} M^2 - u_3 M - \frac{n u_4 F}{6} \left(\frac{H}{M} + u_3 M \right)^{d/2 - 1} \quad (3)$$

wobei die vorkommenden Größen bis auf u_3 , dessen Wert insbesondere am kritischen Punkt unbestimmt bleibt, bekannt sind. Wesentlich ist aber in erster Linie nur, ob u_3 am Phasenübergang verschwindet, weil eventuell irrelevant, oder ob es positiv bleibt.

Es ist aufschlußreich, kurz eine Betrachtung des MF-Bereichs $d > 4$ voranzustellen. Dort kann man $(H/M + u_3 M)^{d/2 - 1}$ gegen $H/M + u_3 M$ vernachlässigen, wenn kleine H und M betrachtet werden. Man beachte, daß t negativ ist für $T < T_c$, wobei T_c durch $H=0$ und $M=0$ definiert ist. Läßt man jetzt in der Zustandsgleichung für $H=0$ die Magnetisierung gegen null gehen, so erkennt man, daß die Lösung $t=0$, $M=0$ nicht auf kontinuierliche Art erreicht werden kann, solange nicht $u_3=0$ ist. Wir werden unten sehen, daß Letzteres erst für $d > 6$ der Fall ist, so daß wir im Bereich $2 < d < 6$ einen Phasenübergang erster Ordnung erwarten. Für $4 < d < 6$ kann man einfach nachrechnen, daß die stabile Lösung des Ordnungsparameters für $t=0$ gleich $M=6u_3/u_4$ ist. Hierbei ist entscheidend wichtig, daß $u_4(T_c)=0$ gilt, obwohl u_4 für $d > 4$ irrelevant ist und zum Beispiel am Gaußschen-Fixpunkt verschwindet. Dieser Fixpunkt ist aber gegenüber u_3 -Störungen instabil, weshalb u_4 auch endlich bleibt. Es sei hier bemerkt, daß die Aussagen der RG-Theorie und der Diagramm-Theorie voneinander unabhängig und konsistent sind.

Wir wollen jetzt im Detail den nichttrivialen Bereich $2 < d < 4$ betrachten. In diesem Bereich gilt für kleine H und M

$$\frac{H}{M} + u_3 M \ll \left(\frac{H}{M} + u_3 M \right)^{d/2 - 1} \quad (4)$$

so daß die Skalen-Form der Zustandsgleichung lautet

$$\frac{H}{M^\delta} = \left(\frac{t}{M^{1/\beta}} + 1 \right)^\gamma - \frac{u_3}{M^{\omega_3}} \quad (5)$$

Man erwartet, daß diese Gleichung exakt gilt, wenn man nur die richtigen Exponenten einsetzt und zuvor Felder und Temperaturen geeignet normiert hat (Wir haben die Skalen-Form der Zustandsgleichung bis $O(1/n)$ getestet). Um die stabile Lösung für die

Magnetisierung bei $t=0$ zu finden, bestimmen wir zunächst die Helmholtz-Energie, die sich in normierter Form ergibt als

$$\beta A = \int dM H(M) = - \frac{u_3}{3} M^3 + \frac{d/2-1}{d} (t + M^2)^{d/(d-2)} \quad (6)$$

Die stabile Lösung der Magnetisierung im Temperaturbereich zwischen T_c und $T_1 \approx T_c$ minimisiert die Helmholtz-Energie und lautet

$$M(T) = a(T) u_3^{(2-\epsilon)/(2+\epsilon)}; \quad a(T_c) = (nF)^{2/(2+\epsilon)} \quad (7)$$

wobei $a(T)$ sich nur langsam mit der Temperatur ändert. Die Temperatur T_1 trennt die geordnete- von der ungeordneten Phase, weil oberhalb T_1 die Helmholtz-Energie durch $M=0$ minimal wird. Daher findet bei dieser Temperatur ein Phasenübergang erster Ordnung statt, solange u_3 nicht verschwindet. Der Sprung der Magnetisierung ist durch Gleichung (7) gegeben. Die Stabilitätsgrenze der metastabilen Phase oberhalb T_1 ergibt sich als (die Temperatur wird von T_c aus gemessen)

$$T_2 - T_c = b \frac{2+\epsilon}{2-\epsilon} \left(\frac{2-\epsilon}{4}\right)^{4/(2+\epsilon)} u_3^{2(2-\epsilon)/(2+\epsilon)}; \quad b = u_4 (nF)^{4/(2+\epsilon)}/6 \quad (8)$$

Die Entwicklung bis $O(1/n)$ wird auch hier durch die Anwendung der Ward-Identität-Methode von Lee¹⁵⁸ sehr vereinfacht. Wir benutzen dabei wieder die Invarianz der Zustandssumme unter einer infinitesimal gewählten Drehung der Spin-Integrationsvariablen, die durch eine antisymmetrische Matrix C vermittelt sei. So ergibt sich eine exakte Relation, mit deren Hilfe $r_T = \chi_T^{-1}(q=0)$ als Funktion von H und M bestimmt werden kann. Man findet

$$0 = C_{11}^T M + C_T^{11} H/r_T + u_3 \int_{x,t,\alpha,\beta} \sum \left(\langle S_{t\beta}(x) (S_{1\alpha}^2(x) - S_{2\alpha}^2(x)) S_T(0) \rangle C_{t\beta}^{1\alpha} - \right. \\ \left. - 2 C_{t\beta}^{2\alpha} \langle S_{t\beta}(x) S_{1\alpha}(x) S_{2\alpha}(x) S_T(0) \rangle \right) \quad (9)$$

Im kritischen Bereich erwarten wir auf der Koexistenzkurve ($H=0$) ein divergierendes Potenzverhalten der transversalen Suszeptibilität gemäß

$$r_T \propto u_3 M^{\psi_3}; \quad r_{21}/r_T = \text{konst.} \quad (10)$$

Aus der Entwicklung von (9) nach $1/n$ erhalten wir in $O(1/n)$

$$r_T = u_3 M \left(1 + \frac{12}{n} A(\epsilon) \ln M \right); \quad r_{21} = 3 r_T \quad (11)$$

und damit

$$\psi_3 = 1 + \frac{12}{n} A(\epsilon) + O(n^{-2}) \quad (12)$$

wobei $A(\epsilon) = \sin(\pi\epsilon/2) \Gamma(2-\epsilon) / (\pi \Gamma^2(2-\epsilon/2))$.

Bei Anwesenheit einer einzigen Skalenvariablen M erwartet man aus Dimensionsgründen, daß r_T proportional zu $M^{\delta-1}$ für $M \rightarrow 0$ ist. Bei einem diskontinuierlichen Übergang aber, dessen Unstetigkeit auf einen relevanten Parameter (hier u_3) zurückgeht, geht dieser Parameter in die Beziehung zwischen r_T und M ein und modifiziert daher durch seine Dimension den oben genannten Exponenten von M . Hierbei ist zur Zeit theoretisch nicht zu beantworten, ob die effektive (renormierte) Größe u_3 bei Annäherung an T_1 näherungsweise konstant ist, was wir annehmen wollen, oder irgendeine charakteristische Temperatur-Abhängigkeit besitzt. Dabei ist lediglich das nicht möglich, daß $u_3(M)$ zu $r_T \propto M^{\delta-1}$ und damit zu einem kontinuierlichen Übergang führt, solange u_3 relevant ist. Genau dieses Verhalten von u_3 stellt sich aber von selbst ein, wenn u_3 irrelevant ist. Ebenso kann man durch die Beziehung

$$u_3 \propto M^{\varphi_3/\beta} \quad (13)$$

den crossover zum kontinuierlichen Übergang am isotropen kritischen Punkt erzeugen. Zusammen mit der obigen Dimensionsbetrachtung ergibt sich so das Analogon zur Wallace'schen Skalenrelation $\psi_\Delta = (\delta-1)(1-\varphi_\Delta/\delta)$ als:

$$\psi_3 = (\delta-1) (1 - \varphi_3/\delta) \quad (14)$$

Auffallend ist die einfache Beziehung zwischen ψ_3 und ψ_Δ in $O(1/n)$ mit

$$\psi_3 = \psi_\Delta/2 + O(n^{-2}) \quad (15)$$

Wir wollen versuchen, weitere einfache Beziehungen zwischen den zu der u_3 - bzw. Δ -Störung gehörenden Exponenten abzuleiten. Dazu diskutieren wir zunächst den crossover-Exponenten φ_3 , der die Relevanz der u_3 -Störung beschreibt. Auch hier bedeutet ein negatives φ die Irrelevanz der Störung, was am besten mit Hilfe der 3-Punkt-Vertices veranschaulicht werden kann:

das Skalenverhalten des renormierten (vollen) 3-Punkt-Vertex Γ_3 wird bei geskaltem u_3 im crossover-Bereich zum isotropen Verhalten gegeben durch

$$\Gamma_3 = \Gamma_{30} \tau^{\alpha_3} \quad (16)$$

wobei die Konstante Γ_{30} dimensionslos ist (α_3 wird unten bestimmt). Für die Diagrammentwicklung in der ungeordneten Phase ist es zweckmäßig anzusetzen

$$\Gamma_3 \propto u_3 \tau^{\alpha_4} \quad (17)$$

Dieselbe Dimensionsanalyse wie zuvor liefert für φ_3 die Zerlegung

$$\varphi_3 = \gamma \alpha_3 - \gamma \alpha_4 \quad (18)$$

Die Gleichungen (16) und (17) reproduzieren das Kriterium für die Ordnung des Phasenübergangs oder die u_3 -Relevanz in Übereinstimmung mit der Callan-Symanzik Theorie. Es besagt, daß für $u_3 \neq 0$ der isotrope Fixpunkt mit $\Gamma_{30}=0$ nur dann mit $r \rightarrow 0$ erreicht wird, wenn $\alpha_3 - \alpha_4$ respektive φ_3 negativ ist, denn es gilt

$$\Gamma_{30} \propto u_3 r^{\alpha_3 - \alpha_4} \quad (19)$$

Ist dagegen $\alpha_3 > \alpha_4$, so ist der isotrope Fixpunkt instabil und der Phasenübergang von erster Ordnung.

Zur Berechnung von α_3 ist es nützlich, die Skalentheorie von Polyakov zu verwenden. Mankann dabei auch gleich die Beziehung zwischen Γ_3 - und Γ_4 -Vertex berücksichtigen, indem man die folgenden Dimensionsbetrachtungen anstellt

$$\begin{aligned} \times & \propto \text{diagram with two internal vertices} \Rightarrow \Gamma_4 \propto \Gamma_4^2 g^2 p^d \propto r^{(\epsilon-2\eta)/(2-\eta)} \\ \times & \propto \text{diagram with one internal vertex} \Rightarrow \Gamma_4 \propto \Gamma_3^2 g \Rightarrow \Gamma_3 \propto r^{(1+\epsilon/2-3\eta/2)/(2-\eta)} \end{aligned} \quad (20)$$

Unter Verwendung von $\eta=0(\epsilon^2)$ und $\eta=2\epsilon \frac{2-\epsilon}{4-\epsilon} A(\epsilon) n^{-1} + O(n^{-2})$ ergibt sich

$$\alpha_3 = \begin{cases} (2+\epsilon)/4 + O(\epsilon^2) \\ (2+\epsilon)/4 - \frac{\epsilon(2-\epsilon)A(\epsilon)}{4n} + O(n^{-2}) \\ (1+\alpha_1)/2 \quad (\text{exakt}) \end{cases} \quad (21)$$

Den Exponenten α_4 berechnen wir durch Renormierung des 'Potts-Vertex' u_{3p} , der durch folgende der Symmetrie angepaßte Zerlegung des 3-Punkt-Vertex definiert ist, die sowohl in der geordneten wie in der ungeordneten Phase gilt

$$\begin{aligned} \Gamma_3^{t\alpha, t'\alpha', t''\alpha''} &= \int_{x,y} \langle S_{t\alpha}(0) S_{t'\alpha'}(x) S_{t''\alpha''}(y) \rangle_c / \left(\int_x \langle S_{t\alpha}(0) S_{t\alpha}(x) \rangle \int_x \langle S_{t'\alpha'}(0) S_{t'\alpha'}(x) \rangle \int_x \langle S_{t''\alpha''}(0) S_{t''\alpha''}(x) \rangle \right) \\ &= u_{34} (\delta_{t\alpha, L} \delta_{t'\alpha', t''\alpha''} + \delta_{t'\alpha', L} \delta_{t\alpha, t''\alpha''} + \delta_{t''\alpha'', L} \delta_{t\alpha, t'\alpha'}) \\ &\quad + u_{3p} \delta_{\alpha\alpha'\alpha''} (\delta_{t t' t'' 1} - (\delta_{t 1} \delta_{t' t'' 2} + \delta_{t 1} \delta_{t'' 2} + \delta_{t'' 1} \delta_{t' 2})) \end{aligned} \quad (22)$$

wobei L die longitudinale Komponente $(1,1)$ bezeichnet, während die δ 's verallgemeinerte Kronecker-Deltas sind. u_{3p} bezeichnet den 3-Vertex mit Potts'scher Symmetrie; der andere Teil des 3-Vertex Γ_3 , nämlich u_{34} , ist u_4 -induziert und verschwindet nur in der geordneten Phase nicht. Da u_{34} unabhängig von irgendwelchen Anisotropien auftritt, findet man das isotrope Skalenverhalten entsprechend dem von Gleichung (16) als

$$u_{34} = \begin{cases} -\frac{1}{3} u_4 M^{(\delta-1) \left[\frac{2+\epsilon}{4} - \epsilon(2-\epsilon)A(\epsilon)/(4n) \right]} & (\text{in geordneter Phase}) \\ 0 & (\text{in ungeordneter Phase}) \end{cases} \quad (23)$$

Dagegen erhalten wir für die mit u_{34} konkurrierende Wechselwirkung

$$u_{3p} = \begin{cases} 2 u_3 M^{(\delta-1) (3(2-\epsilon)A(\epsilon)/n)} & (\text{in geordneter Phase}) \\ 2 u_3 r^{3(2-\epsilon)A(\epsilon)/n} & (\text{in ungeordneter Phase}) \end{cases} \quad (24)$$

und damit nach Gleichung (17) für α_4 sowie für die kritische Spindimension:

$$\alpha_4 = \frac{3}{n} (2-\epsilon)A(\epsilon) + O(n^{-2}) = \frac{\alpha_2}{2} + O(n^{-2}) \Rightarrow \bar{n}_3 = (12+\epsilon) \frac{2-\epsilon}{2+\epsilon} A(\epsilon) \quad (25)$$

Dieses $O(1/n)$ -Resultat besagt, daß bei $d=3$ der isotrope kritische Punkt mit kontinuierlichem Verhalten nur für $n < \bar{n}_3(3) = 1.8$ attraktiv ist. Da α_4 in $O(1/n)$ zwangsläufig stark überschätzt wird, ist der tatsächliche Wert $\bar{n}_3(3)$ wesentlich kleiner als 1.8 und es darf als sicherrgelten, daß der Phasenübergang des Potts-Modells in drei Dimensionen von erster Ordnung ist. Eine weitere u_3 - Δ -Korrespondenz zwischen den crossover-Exponenten

$$2 \varphi_3 = \varphi_\Delta + \gamma + O(n^{-2}) \quad (26)$$

läßt überdies daran zweifeln, ob die kritische Spin-Dimension überhaupt positiv ist, denn für $n=1,2$ und 3 erwartet man $\gamma \geq 1$ und φ_Δ negativ aber betragsmäßig klein.

Um die bei so kleinen n unsicheren $O(1/n)$ -Ergebnisse zu untermauern und um die u_3 - Δ -Korrespondenz zu erweitern, diskutieren wir im folgenden die ϵ -Entwicklung der entsprechenden Größen. Wir gehen dazu wie bei der $1/n$ -Entwicklung vor. Die ϵ -Entwicklung beruht auf der Größenabschätzung M^{-2} , u_3^2 , $u_4=O(\epsilon)$. Wir erhalten in $O(\epsilon)$

$$\begin{aligned} \psi_3 &= 1 + 6\epsilon/(n+8) \\ \alpha_4 &= \frac{3\epsilon}{n+8} \rightarrow \alpha_3 - \alpha_4 = \frac{1}{2} + \frac{n-4}{n+8} \frac{\epsilon}{4} \end{aligned} \quad (27)$$

so daß die $O(\epsilon)$ -Approximation ebenfalls auf die einfachen Beziehungen $\psi_3 = \psi_4/2$ und $\alpha_4 = \alpha_2/2$ führt. Aufgrund der Diagrammtopologien kann man vermuten (ohne die Diagramme selbst auswerten zu müssen), daß diese Beziehungen erst in $O(\epsilon^3)$ zusammenbrechen und kompliziertere Formen annehmen. Der Exponent $\alpha_3 - \alpha_4$ reproduziert das Resultat von Amit und Shcherbakov für $\partial\beta_3/\partial u_3$ am XY-Fixpunkt (β_3 ist dabei die Callan-Symanzik Funktion, deren Nullstellen die Fixpunkte liefern). Die Größe $\alpha_3 - \alpha_4$ bestimmt die Stabilität des isotropen Fixpunkts, wenn man die Entwicklung in der ungeordneten Phase verwendet, welche auf $\bar{n}_3 = 4(\epsilon - 4)/(2 + \epsilon)$ führt; in der geordneten Phase ist dagegen der Exponent $(\delta - 1)(\alpha_3 - \alpha_4)$ entscheidend, der näherungsbedingt auf ein anderes Ergebnis $\bar{n}_3 = -2(\epsilon + 4)/(1 + \epsilon)$ führt, das vom ersten um $O(\epsilon^2)$ differiert. Die formale Entwicklung der beiden Resultate nach ϵ liefert $\bar{n}_3 = -8 + 6\epsilon + O(\epsilon^2)$. Dieses Ergebnis darf man jedoch nicht als die ϵ -Entwicklung der kritischen Spindimension ansehen, denn in dem Bereich mit $n + 8 \approx \epsilon$ ist der kritische Wert von u_4 nicht mehr proportional zu ϵ , sondern nach Rechnungen in höherer Ordnung in u_4 proportional zu $\sqrt{\epsilon}$. Daher existiert in diesem Bereich gar keine ϵ -Entwicklung. Die ϵ -Entwicklung von Gleichung (27) bleibt aber zumindest für jedes positive n gültig und man sieht so auch, daß $\alpha_3 - \alpha_4$ stets positiv und damit u_3 auch relevant ist.

Eine ermutigende Übereinstimmung zwischen unseren $O(\epsilon)$ - und $O(1/n)$ -Rechnungen und einer numerischen RG-Analyse von Golner¹⁵⁹ ergibt sich bezüglich des Exponenten ω_3^{-1} , der die Größe und das Skalenverhalten der Diskontinuität des Ordnungsparameters gemäß

$$M \propto u_3^{\omega_3^{-1}} \quad (28)$$

beschreibt. Man findet zum Beispiel in $O(\epsilon)$

$$\omega_3^{-1} = 1 - \frac{n+2}{n+8} \epsilon \quad (29)$$

und

$$2\omega_3 = \omega_d + \delta - 1 \quad (30)$$

Für reale physikalische Systeme sind die folgenden Werte von ω_3^{-1} für $n=2$ und $d=3$ wichtig

	$O(\epsilon)$	$O(1/n)$	RG-numerisch (Golner)	
ω_3^{-1}	0.6	0.69	0.56	(31)

IV. Zusammenfassung

Eines der Ziele der vorliegenden Arbeit war, das crossover-Verhalten insbesondere bei strukturellen Phasenübergängen mit anisotropem Druck zu erklären. Die besonderen Schwierigkeiten, die bei der Analyse des crossover-Bereichs als Folge der Beteiligung zweier Fixpunkte und zweier kritischer Variablen auftreten, konnten durch eine geeignete Formulierung der $1/n$ -Entwicklung bewältigt werden. Die Resultate sind nach dem heutigen Stand der Experimente mit diesen in Übereinstimmung. Unser $1/n$ -Entwicklungsverfahren zeigt außerdem den Weg zu einer Behandlung von Skalenfunktionen mit mehr als zwei kritischen Variablen, die speziell bei der kritischen Streuung an axial anisotropen Materialien von Bedeutung sind.

Die Rolle, die kubisch-quartische Anisotropie für das kritische Verhalten spielt, haben wir unter verschiedenen Bedingungen bei allgemeinen Vielkomponentensystemen untersucht. Dabei ergab sich die Relevanz kubischer Störungen mit neuen Exponenten bei ein- und zweidimensionalen Systemen mit mehr als zwei kritischen Komponenten für gewisse langreichweitige Wechselwirkungen, obwohl längere Reichweiten im allgemeinen isotropes kritisches Verhalten begünstigen. In dem physikalisch interessanteren Fall kurzreichweitiger Wechselwirkungen haben wir bei Modellen, die sowohl relevante kubische wie axial anisotrope Störungen besitzen, einen neuen trikritischen Punkt gefunden. Die Ursache für dieses kubisch-axiale trikritische Verhalten liegt in der Konkurrenz zwischen einer kubischen Störung, die die Unstetigkeit des Phasenübergangs begünstigt, und der die Diskontinuität reduzierenden axialen Anisotropie. Es ist bisher experimentell noch nicht untersucht, ob derartiges trikritisches Verhalten beispielsweise in SrTiO_3 realisiert ist.

Den Riedel-Wegner-Typ trikritischen Verhaltens haben wir bei Anwesenheit axialer Anisotropie diskutiert und dabei das trikritische order-disorder Verhalten des vierkomponentigen Ammoniumchlorids unter Druck in qualitativer Weise erklärt.

In dem letzten Abschnitt haben wir nachgewiesen, daß ein dreidimensionales Potts-Modell mit drei Zuständen stets einen Phasenübergang hat, wovon Jahn-Teller induzierte Phasenübergänge und solche zwischen isotroper und nematischer Struktur flüssiger Kristalle betroffen sind. Eigenschaften dieses diskontinuierlich kritischen Verhaltens werden untersucht und Beziehungen zu dem kubisch-kritischen Verhalten von erster Ordnung abgeleitet.

V. Anhang

a. Normierung der Zustandsgleichung von Kap. III.3.a

Die Zustandsgleichung lautet in $O(n^0)$

$$\begin{aligned} 0 &= r_0 - r_{oc}(g) + \frac{u_0}{6} M^2 - \Delta M^2 + \frac{m u_0}{6} \int_g \left(\frac{1}{q^2 + r_0^2} - \frac{1}{q^2} \right) + \frac{(n-m) u_0}{6} \int_g \left(\frac{1}{q^2 + r_0^2} - \frac{1}{q^2 + g} \right) \\ &= r_0 - r_{oc}(g) + \frac{u_0}{6} M^2 - \left(\frac{H}{M} + \Delta M^2 \right) - \frac{m u_0}{12} K_d B(1-\epsilon_1, \epsilon_2) \left(\frac{H}{M} + \Delta M^2 \right)^{1-\epsilon_1/2} \\ &\quad - \frac{(n-m) u_0}{12} K_d B(1-\epsilon_1, \epsilon_2) \left[\left(\frac{H}{M} + \Delta M^2 + g \right)^{1-\epsilon_1/2} - g^{1-\epsilon_1/2} \right] \end{aligned}$$

Sei $r_0 - r_{oc}(g) = t(g)$ und $c \equiv \frac{m u_0 K_d B(1-\epsilon_1, \epsilon_2)}{12}$

Verwendet man die folgenden normierten Größen

$$\begin{aligned} t'(g) &= c^{-2/\epsilon} t(g), \quad H' = \sqrt{\frac{u_0}{6}} c^{-3/\epsilon} H, \quad M' = \sqrt{\frac{u_0}{6}} c^{-1/\epsilon} M \\ \Delta' &= \frac{6}{u_0} \Delta, \quad g' = c^{-2/\epsilon} g \end{aligned}$$

so ergibt sich die normierte Gleichung in der Form

$$\begin{aligned} 0 &= t'(g) + M'^2 - \left(\frac{H'}{M'} + \Delta' M'^2 \right) - \frac{m}{n} \left(\frac{H'}{M'} + \Delta' M'^2 \right)^{1-\epsilon_1/2} - \\ &\quad - \frac{n-m}{n} \left[\left(\frac{H'}{M'} + \Delta' M'^2 + g' \right)^{1-\epsilon_1/2} - g'^{1-\epsilon_1/2} \right] \end{aligned}$$

b. Berechnung einer Diagramm-Blase durch Integraldarstellung der Propagatoren

Die Diagramm-Blase ist gegeben durch

$$\pi(r, p) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \frac{1}{k^2 + r} \frac{1}{(k+p)^2 + r} \equiv \text{Diagramm einer Blase mit zwei Propagatoren}$$

Mit der Integraldarstellung

$$\frac{1}{k^2 + r} = \int_0^\infty dx e^{-x(k^2 + r)}$$

erhalten wir

$$\begin{aligned} \pi(r, p) &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \int_0^\infty dx dy e^{-x(r + k^2) - y(r + (k+p)^2)} \\ &= \frac{k_{d-1}}{2\pi} \int dk k^{d-1} d\vartheta (\sin \vartheta)^{d-2} \int dx dy e^{-(x+y)r - xk^2 - y(k^2 + p^2 + 2pk \cos \vartheta)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \int d\vartheta (\sin \vartheta)^{d-2} e^{-2ypk \cos \vartheta} &= \int_{-1}^{+1} d\cos \vartheta (1 - \cos^2 \vartheta)^{\frac{d-3}{2}} e^{-2ypk \cos \vartheta} \\ &= 2^{1-\epsilon_2} \frac{1}{\Gamma(\frac{3}{2} - \frac{\epsilon}{2})} \frac{1}{(2ypk)^{1-\epsilon_2}} I_{1-\epsilon_2}(2ypk) \end{aligned}$$

Es verbleiben k, x und y -Integrationen, von denen wir zuerst die k -Integration nach Formel 11.4.29 nach Abramowitz-Stegun¹⁶⁰ (sowie 9.6.3)

$$\int dk k^{2-\epsilon/2} e^{-(x+y)k^2} I_{1-\epsilon/2}(2ypk) = \frac{1}{2} (yp)^{1-\epsilon/2} \frac{1}{(x+y)^{2-\epsilon/2}} e^{y^2 p^2 / (x+y)}$$

$$\Rightarrow \pi(r, p) = \frac{1}{(4\pi)^{2-\epsilon/2}} \int_0^\infty dx dy \frac{1}{(x+y)^{2-\epsilon/2}} e^{-(x+y)r - \frac{xy}{x+y} p^2}$$

Transformation auf neue Integrationsvariable $x = \frac{u+v}{2}, y = \frac{u-v}{2}$

$$D = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial x}{\partial v} \\ \frac{\partial y}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial v} \end{vmatrix} = \frac{1}{2}$$

$$\Rightarrow \pi(r, p) = \frac{1}{2} \frac{1}{(4\pi)^{2-\epsilon/2}} \int_0^\infty du \int_{-u}^u dv \frac{1}{u^{2-\epsilon/2}} e^{-u(r + p^2/4) + v^2/4u p^2}$$

$$\text{mit } \int_{-u}^u dv e^{\frac{v^2}{4u} p^2} = \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n!} \frac{p^{2n}}{(4u)^n} \int_{-u}^u dv v^{2n} = 2 \sum_{n=0}^\infty \frac{p^{2n}}{n! (2n+1)} \frac{1}{4^n} u^{n+1}$$

folgt

$$\begin{aligned} \pi(r, p) &= \frac{2^{-d} \pi^{-d/2}}{(r + p^2/4)^{\epsilon/2}} \sum_{n=0}^\infty \frac{1}{n! (2n+1)} \Gamma(n+\epsilon/2) \left(\frac{p^2}{4r+p^2} \right)^n \\ &= \frac{2^{-d} \pi^{-d/2} \Gamma(\epsilon/2)}{(r + p^2/4)^{\epsilon/2}} F\left(\frac{\epsilon}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; \frac{p^2}{4r+p^2}\right) \end{aligned}$$

VI. Literaturverzeichnis

1. H.E. Stanley, Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, 1971
2. F. Wegner, Critical Phenomena and the Renormalization Group, 1973, preprint
3. K. Jüngling und G. Obermair, J.Phys.C8,L31 (1975)
und R.J. Baxter, Phys.Rev.Lett.26,832 (1971)
4. J.T. Ho und J.D. Litster, Phys.Rev.Lett.22,603 (1969)
5. P. Heller und G.B. Benedek, Phys.Rev.Lett.8,428 (1962)
6. J.P. Legrand, J.P. Renard und M.Aidan, Phys.Lett. 48A, 123 (1974)
7. P.R. Roach, Phys.Rev.170,213 (1970)
8. K.A. Müller und W. Berlinger, Phys.Rev.Lett.26,13 (1971)
9. M.E. Fisher, Rev.Mod.Phys.46,597 (1974)
10. A.M. Polyakov, Zh.Eksp.Teor.Fiz.55,1026 (1968) (Sov.Phys.-JETP 28,533 (1969))
11. K.G. Wilson, Phys.Rev. B4,3174 und 3184 (1971)
12. K.G. Wilson, Phys.Rev.Lett.28,540 (1972)
13. S.K. Ma, Phys.Rev. A4,2172 (1973)
14. K.A. Müller, Helv.Phys.Acta 31,173 (1958)
15. P.A. Fleury, J.F. Scott und J.M. Worlock, Phys.Rev.Lett.21, 16 (1968)
16. H. Unoki und T. Sakudo, J.Phys.Soc.Jap.23,546 (1967)
17. K.A. Müller, W. Berlinger und J.C. Slonczewski, Phys.Rev. Lett.25,734 (1970)
18. A. Aharony und A.D. Bruce, Phys.Rev. B11,478 (1975)
19. R. Oppermann, Phys.Lett.47A,383 (1974)
20. R. Oppermann, Z.f.Phys.B20,405 (1975)
21. H. Thomas und K.A. Müller, Phys.Rev.Lett.21,1256 (1968)
22. J.C. Slonczewski und H. Thomas, Phys.Rev. B1,3599 (1970)
23. J.C. Slonczewski, Phys.Rev. B2,4646 (1970)
24. M. Blume, V.J. Emery und R.B. Griffith, Phys.Rev. A4,1071(1971)
25. D.J. Amit und C. De Dominicis, Phys.Lett.45A,193 (1973)
26. C.W. Garland und R. Renard, J.Chem.Phys.44,1130 (1966)
27. A.V. Voronel und S.R. Garber, Sov.Phys.-JETP 25,970 (1967)
28. N.J. Trappeniers und W. Mandema, Physica 32,1170 (1966)
29. J.F. Scott, Rev.Mod.Phys.46,83 (1974)
30. H. Thomas, Varenna Lectures 1973
31. C.W. Garland und R. Renard, J.Chem.Phys.44,1120 und 1125 (1966)

32. Y. Sakamoto, J.Sci.Hiroshima Univ.A18,95 (1954)
33. C.W. Garland und B.B. Weiner, Phys.Rev. B3,1634 (1970)
34. W. Mandema, Academisch Proefschrift, Amsterdam (1970)
35. W.B. Yelon und D.N. Cox, Solid State Commun.11,1011 (1972)
36. K.H. Michel, Varenna Lectures 1973
37. K.H. Michel, J.Chem.Phys.58,142 (1972)
38. K.H. Michel, J.Chem.Phys.58,1143 (1972)
39. E. Mohler und R. Pitka, Solid State Commun.14,791 (1974)
40. H. Wagner und J. Swift, Z.f.Phys.239,182 (1970)
41. H. Wagner, Phys.Rev.Lett.25,31 (1970)
42. H. Horner, Z.f.Phys.251,202 (1972)
43. M.E. Fisher, Phys.Rev. 176,257 (1968)
44. G.A. Baker,Jr. und J.W. Essam, Phys.Rev.Lett.24,447 (1970)
45. G.A. Baker,Jr. und J.W. Essam, J.Chem.Phys.55,861 (1971)
46. A.I. Larkin und S.A. Pikin, Sov.Phys.-JETP 29,891 (1969)
47. A. Hüller, Z.f.Phys.254,456 (1972)
48. A. Aharony, Phys.Rev. B8,4314 (1973)
49. R. Oppermann, J.Phys.C7,L366 (1974)
50. J.D. Dunitz und L.E. Orgel, J.Phys.Chem.Solids 3,20 (1957)
51. C. Friebel und D. Reinen, Z.Naturforschung 24A,1518 (1970)
52. H. Thomas und K.A. Müller, Phys.Rev.Lett.28,820 (1972)
53. K.H. Höck, Diplomarbeit, Frankfurt a.M. (1973)
54. H. Kaufmann, Diplomarbeit, Frankfurt a.M. (1973)
55. M.J. Stephen und J.P. Straley, Rev.Mod.Phys.46,617 (1974)
56. W.L. McMillan, Phys.Rev.A4,1238 (1971)
57. B.I. Halperin, T.C. Lubensky und Shang-keng Ma, Phys.Rev.Lett. 32,292 (1974)
58. J. Zadoc-Kahn, Annales de Phys.6,31 (1936)
59. P.G. de Gennes, Phys.Lett. 30A,454 (1969)
60. T.C. Lubensky und R.G. Priest, Phys.Lett.48A,103 (1974)
61. R.B. Potts, Proc.Camb.Phil.Soc.48,106 (1952)
62. R. Oppermann, J.Phys.A8,L43 (1975)
63. S. Alexander, Solid State Commun.14,1069 (1974)
64. D.J. Amit und A. Shcherbakov, J.Phys.C7,L96 (1974)
65. M. Weger, Solid St. Phys.28,1 (1973)
66. R. Kragler, Dissertation, Frankfurt a.M. (1974)
67. D. Mukamel, Phys.Rev.Lett.34,481 (1975)
68. M.R. Alben, C.R.Acad.Sci.,Ser.B279,111 (1974)
69. R.J. Baxter, Ann.Phys.70,193 (1972)
70. K.H. Jüngling und G. Obermair, J.Phys.C7,L363 (1974)
71. J. v.Heimburg und H. Thomas, J.Phys.C7,3433 (1974)
72. R. Balian und G. Toulouse, Ann.Phys.83,28 (1974)

73. W. Camp, Phys.Rev.B8,4307 (1973)
74. P. Weiss, J.Phys.Radium, Paris 6,667 (1907)
75. T.H. Berlin und M.Kac, Phys.Rev.86,821 (1952)
76. L.P. Kadanoff et al, Rev.Mod.Phys.39,395 (1967)
siehe auch Ref.30
77. H.E. Stanley, Phys.Rev.176,718 (1968)
78. E. Ising, Z.f.Physik31,253 (1925)
79. L. Onsager, Phys.Rev.65,117 (1944)
80. L.D. Landau, Collected Papers of L.D. Landau, Gordon and Breach,
New York (1965)
81. F. Wegner und E.K. Riedel, Phys.Rev.7,248 (1973)
82. N.D. Mermin und H. Wagner, Phys.Rev.Lett.34,568 (1966)
83. Th. Niemeijer und J.M.J. van Leeuwen, Phys.Rev.Lett.31,1411 (1973)
84. Th. Niemeijer und J.M.J. van Leeuwen, Physica 71,17 (1974)
85. D.M. Lublin, Phys.Rev.Lett.34,568 (1975)
86. G.S. Joyce, Phys.Rev.146,349 (1966)
87. M. Lax, J. Chem. Phys. 20,1351 (1952)
88. T.H. Berlin und J.S. Thomson, J.Chem.Phys.20,1368 (1952)
89. R.A. Toupin und M. Lax, J.Chem.Phys.27,458 (1957)
90. L.P. Kadanoff, Physics 2,263 (1966)
91. A.M. Polyakov, Sov.Phys.-JETP 28,533 (1969)
92. A.A. Migdal, Sov.Phys.-JETP 28,1036 (1969)
93. A.A. Migdal, Sov.Phys.-JETP 32,552 (1971)
94. K.G. Wilson und M.E. Fisher, Phys.Rev.Lett.28,248 (1972)
95. A.M. Polyakov, Sov.Phys.-JETP 30,151 (1970)
96. V.N. Gribov und A.A. Migdal, Sov.Phys.-JETP 28,784 (1969)
97. K.G. Wilson und J. Kogut, Phys.Rept.12C,75 (1974)
98. F. Wegner und A. Houghton, Phys.Rev.A8,401 (1973)
99. A. Aharony, Phys.Rev. B8,4270 (1974)
100. M.E. Fisher und P. Pfeuty, Phys.Rev.B1,1889(1972)
101. F. Wegner, Phys.Rev.B6,1891 (1972)
102. H. Wiesner, Dissertation, Frankfurt a.M. (1975)
103. M.E. Fisher und P. Gerber, Phys.Rev.B10,4697 (1974)
104. E. Brezin, D.J. Wallace und K.G. Wilson, Phys.Rev.Lett.29,
591 (1972)
105. B.G. Nickel, unveröffentlicht (1973)
106. E. Brezin, J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin, Phys.Rev.D8,434 (1973)
und Phys.Rev.D8,2418 (1973)

107. E. Brezin, J.C. Le Guillou, J. Zinn-Justin und B.G. Nickel, Phys.Lett.44A,227 (1973)
108. E. Brezin, D.J. Wallace und K.G. Wilson, Phys.Rev.B7,232 (1973)
109. G.M. Avdeeva, Sov.Phys.-JETP 37,377 (1973)
110. M.E. Fisher und A.Aharony, Phys.Rev.B10,2818(1974)
111. A. Aharony, Phys.Rev.9,2107 (1974)
112. B.I. Halperin, P.C. Hohenberg und E.D. Siggia, Phys.Rev.Lett.32 1289 (1974)
113. B.I. Halperin, P.C. Hohenberg und Shang-keng Ma, Phys.Rev.Lett. 29,1548 (1972) und Phys.Rev.B10,139 (1974)
114. Shang-keng Ma und G.F. Mazenko, Phys.Rev.Lett.33,1383 (1974)
115. H. Yahata, Progr.Theor.Phys.51,2003 (1974)
116. C. De Dominicis, preprint (1975)
117. M.E. Fisher, Shang-keng Ma und B.G. Nickel, Phys.Rev.Lett.29, 917 (1972)
118. E. Brezin und D.J. Wallace, Phys.Rev.B7,1967 (1973)
119. D.J. Wallace, J.Phys.C6,1390 (1973)
120. R. Abe, Progr.Theor.Phys.48,1414 (1972) und 49,113 (1973) sowie 49,1877 (1973)
121. M. Suzuki, Progr.Theor.Phys.49,424 und 1106 (1973)
122. R.A. Ferell und D.J. Scalapino, Phys.Rev.Lett.29,413 (1972)
123. I.J. Ketley und D.J. Wallace, J.Phys.A6,1667 (1973)
124. M. Suzuki, preprint (1975)
125. R.A. Cowley und A.D. Bruce, J.Phys.C6,L191 (1973)
126. A. Aharony, Phys.Lett.49A,221 (1974)
127. A. Aharony und A.D. Bruce, Phys.Rev.Lett.33,427 (1974)
128. E.K. Riedel und F. Wegner, Z.f.Phys.225,195 (1969)
129. P.Pfeuty, D. Jasnow und M.E. Fisher, Phys.Rev.B10,2088 (1974)
130. F. Wegner, Phys.Rev.B5,4529 (1972)
131. J. Swift und M.K. Grover, Phys.Rev.A9,2579 (1974)
132. M. Suzuki, Progr.Theor.Phys.49,1451 (1973)
133. M.E. Fisher und D. Jasnow, unveröffentlicht
134. A.D. Bruce, Phys.Lett.48A,317 (1974)
135. A.D. Bruce und R.A. Cowley, J.Phys.C6,2422 (1973)
136. A. Aharony und M.E. Fisher, Phys.Rev.B8,3323 (1973)
137. A. Aharony, Phys.Rev.B8,3342,3349 und 3358 (1973)
138. F. Wegner, J.Phys.C7,2109 (1974)
139. M.K. Grover, L.P. Kadanoff und F. Wegner, Phys.Rev.B6,311 (1972)

140. R. Oppermann, J. Phys. A7, L137 (1974)
141. J. Sak, Phys. Rev. B8, 281 (1973)
142. M. Suzuki, Y. Yamazaki und G. Igarashi, Phys. Lett. 42A, 313 (1972)
143. Y. Yamazaki, Phys. Lett. 49A, 215 (1974)
144. A. Aharony, Phys. Rev. Lett. 31, 1494 (1973)
145. A. Aharony, preprint (1974)
146. F. Wegner, Vorabdruck eines Vortrags in Bonn (1974)
147. E.K. Riedel und F. Wegner, Phys. Rev. Lett. 29, 349 (1972)
148. E.K. Riedel, Phys. Rev. Lett. 28, 675 (1972)
149. J.C. Bonner und J.F. Nagle, J. Appl. Phys. 42, 1280 (1971)
150. S. Hikami, preprint (1975)
151. F. Wegner und E.K. Riedel, Phys. Rev. B7, 248 (1973)
152. E.K. Riedel und F. Wegner, Phys. Rev. B9, 294 (1974)
153. M.J. Stephen und J.L. McCauley, Jr., Phys. Lett. 44A, 89 (1973)
154. H. Horner, Vortrag auf der MECO-Konferenz Regensburg (1975),
wird veröffentlicht
155. E. Brezin, J.C. Le Guillou und J. Zinn-Justin, preprint (1974)
156. I.G. Enting, J. Phys. A7, L617 (1974)
157. R.J. Baxter, preprint (1974)
158. B.W. Lee, 'Chiral Dynamics', Gordon and Breach, New York (1972)
159. G. Golner, Phys. Rev. B8, 339 (1973)

Für die vorbildliche Unterstützung sowohl während der Vorbereitungszeit wie bei der Durchführung der vorliegenden Arbeit möchte ich meinem verehrten Lehrer, Herrn Professor Dr. H. Thomas, sehr herzlich danken. Unzählige anregende Diskussionen mit ihm waren für den raschen Fortgang der Arbeit unerlässlich.

Allen meinen Kollegen habe ich für viele nützliche Diskussionen und Hinweise zu danken, wobei die Zusammenarbeit mit Herrn Dipl. Phys. J. von Heimbürg bei der Besprechung von Wilson's Renormierungsgruppe besonders wertvoll war.

Für weitere Unterstützung möchte ich auch Herrn Prof. Dr. R. J. Jelitto und Herrn Prof. Dr. F. Wegner danken.

LEBENS LAUF

- 15.3.1949 in Frankfurt am Main geboren
- 20.4.1955 Besuch der Grundschule in Pfm.-Griesheim
- 10.4.1959 Eintritt in das Goethe-Gymnasium in Frankfurt/Main
- 26.6.1967 Ablegung der Reifeprüfung
- 10.10.1967 Immatrikulation an der Johann-Wolfgang-Goethe Universität und Studium der Physik und Mathematik
- 23.10.1969 Diplom-Vorprüfung in Physik
- 22.10.1971 Diplom-Hauptprüfung in Physik
Diplomarbeit unter der Anleitung von Herrn Prof.
- 1.11.1971 Wissenschaftlicher Angestellter am Institut für
Theoretische Physik in Frankfurt/Main (Prof.Dr.Thomas)
- 1.11.1974 Wissenschaftlicher Angestellter am Institut für
Theoretische Physik in Heidelberg (Prof.Dr.Wegner)

Meine akademischen Lehrer waren:

Arenhövel, Barth, Bundke, Dänzer, Dembowski, Drechsel, Franz, Fulde, Gebhardt, Greiner, Haug, Jelitto, Köthe, Langbein, Martienssen, Mrowka, Münster, Pilkuhn, Queisser, Scheid, Schopper, Stummel, Thomas, Toepffer, Wegner, Wolf.

